


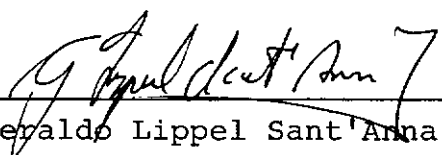
APLICAÇÃO E CALIBRAÇÃO DE UM MODELO  
MATEMÁTICO DE QUALIDADE DE ÁGUA

Gisela Damm Forattini

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE  
PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JA  
NEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO  
GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.)

Aprovada por:

  
\_\_\_\_\_  
Pedro Luis A. Guerrero Salazar  
Presidente

  
\_\_\_\_\_  
Gerald Lippel Sant'Anna Jr.

  
\_\_\_\_\_  
Carlos Celso do Amaral e Silva

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

DEZEMBRO - 1982

FORATTINI, GISELA DAMM

Aplicação e Calibração de um Modelo de Qualidade de Água.

Rio de Janeiro, UFRJ, COPPE, 1982.

xii, 176p. 29,7cm (COPPE-UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 1982)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

1. Modelos Matemáticos de Qualidade de Água.

2. Simulação.

3. Quasilinearização.

I. COPPE/UFRJ

II. Título (série)

Aos meus pais,  
meus irmãos,  
e a Jorge

## AGRADECIMENTOS

Ao Professor Pedro Guerrero, orientador deste trabalho, pelo seu estímulo e interesse.

À Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, pelo auxílio financeiro concedido e pela confiança em mim depositada.

À CETESB/SP, na pessoa do Dr. Carlos Celso do Amaral e Silva, pelos dados fornecidos, indispensáveis à execução deste trabalho.

Ao Professor João Sérgio Fajardo Roldão, pelo grande apoio e incentivo.

A Antônio Juarez S.M. de Alencar, do Núcleo de Computação Eletrônica (NCE/UFRJ), pela atenção e colaboração.

Ao colega João Alfredo Küpper, pela colaboração e amizade.

À Beth, pelos serviços datilográficos e atenção dispensada.

A Soninha, Celma e Elizete, pelo carinho com que sempre me atenderam.

## RESUMO

Devido ao crescente aumento populacional e industrial, o estudo do comportamento de poluentes em cursos d'água, dos modelos sugeridos e dos métodos propostos para otimizá-los, tornou-se objeto de grande interesse.

A maioria dos modelos de qualidade de água utilizados atualmente, são extensões das duas equações, simples, propostas por Streeter e Phelps (1925), para simular as concentrações de Oxigênio Dissolvido (OD) e de Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO), resultantes das descargas de despejos orgânicos biodegradáveis lançados nos sistemas de rios.

O estudo aqui apresentado, analisa o comportamento da poluição em um rio e fornece uma metodologia para calibrar os parâmetros envolvidos no modelo utilizado.

A aplicação é feita utilizando-se o Modelo QUAL-II/SEMCOG, simulando seis constituintes e tomando-se como exemplo o Rio Atibaia (SP).

Na estimativa dos parâmetros é utilizada a técnica de QUASILINEARIZAÇÃO, método efetivo para estimar coeficientes das equações diferenciais resultantes do modelamento da qualidade d'água.

## ABSTRACT

Due to the increasing of the population and of industrial development, the study of pollutants behavior in water bodies, of suggested models and the study of proposed optimizations methods, became a subject of great interest.

Most of water quality models now in use are extensions of two fairly simple equations, proposed by Streeter and Phelps (1925), for predicting the Dissolved Oxygen (DO) and Biochemical Oxygen Demand (BOD) concentrations resulted from the discharge of biodegradable organic waste into river systems.

The study presented here analyses the pollution behavior in a river and provides a methodology to calibrate the parameters involved in the utilized model.

The application is made in Atibaia River (SP) where is utilized the QUAL-II/SEMCOG Model, simulating six constituents.

The parameter estimation problem is solved by Quasilinearization technique, an effective approach for coefficients estimation in differential equations arising from stream quality modelling.

# SUMÁRIO

	pag.
I.. INTRODUÇÃO .....	1
I.1. Generalidades .....	1
I.2. Objetivos .....	6
I.3. Apresentação do Trabalho .....	8
II. FATORES RELEVANTES NA ANÁLISE DA QUALIDADE DA ÁGUA..	10
II.1. Aspectos Gerais na Variação de um Poluente em Cursos de Água .....	10
II.2. Transporte Hidrodinâmico de Materiais Conserva- tivos: Difusão e Advecção .....	12
II.3. Mecanismos de Reação de Materiais Não-Conserva- tivos .....	18
II.3.1. Oxigênio Dissolvido (OD) como Indicador de Poluição .....	19
II.3.2. Fatores Influentes na Concentração de Oxi- gênio Dissolvido na Água .....	20
II.3.2.1. Demanda Bioquímica Carbonácea .....	20
II.3.2.2. Nitrificação - Demanda Bioquímica Nitro- genada .....	26
II.3.2.3. Reaeração .....	32
II.3.2.4. Algas - Fotossíntese e Respiração .....	35
II.3.2.5. Demanda Bêntica .....	38
II.3.2.6. Sedimentação e Arraste .....	40

II.3.2.7. Fósforo .....	42
II.3.2.8. Temperatura .....	43
II.4. A Influência dos Coliformes Fecais na Qualidade da Água .....	44
II.5. Os Materiais Radioativos e a Qualidade da Água.	46
III. MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA .....	49
III.1. Modelos Pesquisados .....	52
III.1.1. Modelo de Streeter-Phelps .....	52
III.1.2. QUAL-I .....	54
III.1.3. SIMOX .....	55
III.1.4. QUAL-II/SEMCOG .....	56
III.1.5. Outros Modelos .....	56
IV. CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO .....	62
IV.1. Introdução .....	63
IV.2. Métodos de Calibração .....	65
IV.2.1. Tentativa e Erro .....	65
IV.2.2. Métodos Automáticos .....	66
IV.2.2.1. Quasilinearização .....	70
IV.2.2.1.1. Introdução .....	70
IV.2.2.1.2. Algoritmo do Método de Quasilineariz zação .....	73
IV.3. Validação .....	86



V.	MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA QUAL-II/SEMCOG .....	88
V.1.	Introdução .....	88
V.2.	Constituintes Simulados .....	90
V.3.	Limitações do Modelo .....	93
V.4.	Equações Básicas .....	95
V.5.	Solução Numérica .....	96
V.6.	Dados Necessários .....	103
V.7.	Cálculo dos Parâmetros .....	104
V.8.	Resultados Obtidos do Modelo .....	109
V.9.	Calibração do QUAL-II/SEMCOG utilizando o Méto- do de Quasilinearização .....	109
VI.	APLICAÇÃO DO MÉTODO DE QUASILINEARIZAÇÃO A UMA SITUA- ÇÃO HIPOTÉTICA .....	118
VII.	APLICAÇÃO DO MÉTODO A UMA SITUAÇÃO REAL .....	125
VII.1.	Aplicação do Modelo QUAL-II/SEMCOG .....	125
VII.1.1.	Descrição da Bacia do Rio Atibaia .....	125
VII.1.2.	Dados Utilizados .....	129
VII.1.3.	Análise de Sensibilidade .....	135
VII.2.	Calibração do Modelo QUAL-II/SEMCOG Utilizando o Método de Quasilinearização para o Caso em Es- tudo - Campanha de Agosto/77 .....	140

VIII. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS .....	143
IX. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES .....	148
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	151
APÊNDICE .....	162

LISTA DE TABELAS

	Pag.
Tabela I.1. Relação entre Constituintes, Qualidade e Uso da Água (O'Connor et alii, 1971) ...	3
Tabela II.1. Equações Empíricas para o Cálculo de $D_L$ (Bansal, 1971) .....	16
Tabela III.1. Modelos Desenvolvidos para o Cálculo de OD e DBO (Shastry, Fan e Erickson, 1973) ....	50
Tabela III.1.A. Variáveis e Parâmetros dos Modelos da Tabela III.1.....	51
Tabela III.2. Características dos Modelos Analisados ....	58
Tabela III.3. Constituintes Simulados pelos Modelos .....	59
Tabela III.4. Dados de Entrada Requeridos pelos Modelos .	60
Tabela III.5. Equações Propostas nos Modelos .....	61
Tabela V.1. Equações Diferenciais Solucionadas pelo Modelo QUAL-II/SEMCOG .....	97
Tabela V.2. Equações Propostas para o Cálculo de $K_2$ ...	107
Tabela VII.1. Valores dos Parâmetros Utilizados nos Perfis da Figura VII.7 - Campanha de Agosto/77.	137

LISTA DE FIGURAS

	Pag.
Figura II.1. Curva Típica de DBO Carbonácea (Ramalho, 1977) .....	25
Figura II.2. Reações Sequenciais da Nitrificação (O'Connor et alii, 1971) .....	30
Figura II.3. Demanda Bioquímica de Oxigênio (Carbonácea e Nitrogenada) (Ramalho, 1977) .....	30
Figura II.4. Ciclo do Nitrogênio (O'Connor et alii, 1973)	31
Figura V.1. Estrutura Geral do Modelo QUAL-II/SEMCOG (Roesner et alii, 1977) .....	89
Figura V.2. Diagrama Esquemático de um Sistema Hipotético e suas Limitações (Roesner et alii, 1977)	91
Figura V.3. Principais Interações entre os Constituintes (Roesner et alii, 1977) .....	94
Figura V.4. Esquema Implícito Clássico .....	98
Figura V.5. Discretização do Sistema de Rio (Roesner et alii, 1977) .....	99
Figura VI.1. Taxas de Convergência de B e D .....	121
Figura VII.1. Localização das Seções Batimétricas e dos Postos Pluviométricos da Rede Básica e Complementar .....	128
Figura VII.2. Rio Atibaia - Trecho Considerado. Localização dos Pontos de Amostragens, Efluentes e Captações Domésticas .....	130

Figura VII.3.	Identificação dos Pontos de Efluentes Urbanos, Industriais e Captações .....	131
Figura VII.4.	Localização da Bacia do Rio Atibaia no Estado de São Paulo .....	131
Figura VII.5.	Trechos e Cargas Considerados para o Rio Atibaia .....	133
Figura VII.6.	Perfis de OD Obtidos com Várias Opções de Cálculo para $K_2$ . (Campanha de Agosto/77) ..	138
Figura VII.7.	Perfis de OD Obtidos com os Parâmetros Originais e com a Calibração por Tentativas. (Campanha de Agosto/77) .....	139

## CAPÍTULO I

## I. INTRODUÇÃO

## I.1. Generalidades

"A conservação do meio ambiente, segundo alguns especialistas, é algo mais que sua preservação. Significa o uso e a gestão adequados dos recursos naturais do ambiente, com vistas à progressiva melhoria da qualidade de vida humana ou à própria sobrevivência" (Monteiro, 1979).

Apesar da insuficiência de dados que permitam melhor qualificação e quantificação das áreas críticas, pode-se ressaltar que, no Brasil, os problemas ambientais, na sua maioria, são ainda passíveis de correção, mas isso demanda mudanças no comportamento social, planejamento adequado e a implantação da infra-estrutura que apóie a execução de uma nova política.

Entre os diversos levantamentos básicos que podem ser considerados necessários à formulação dessa política ambiental, destacam-se os seguintes inventários:

- i - Recursos naturais, envolvendo as características, o estado atual e a capacidade de renovação.
- ii - Agentes que atuam sobre o ambiente, destacan-do-se sua intensidade e efeitos resultantes.
- iii - Recursos humanos, técnicos, financeiros e ins-

titucionais.

No caso de poluição de água, mais especificamente, de rios e canais, o balanço a ser satisfeito para assegurar a preservação e otimizar a sua utilização, visa equilibrar as cargas poluentes com a capacidade de autodepuração dos receptores.

Do ponto de vista do controle e gerenciamento da qualidade da água, faz-se necessário examinar os problemas relacionados em termos de constituintes específicos ou grupos de constituintes, descarregados em rios, como resultado de atividades humanas ou fenômenos naturais. A Tabela I.1 (O'Connor et alii, 1971) lista alguns desses constituintes.

A contaminação da água (ou poluição, quando atingidas condições críticas) pode ser definida como a degradação de sua qualidade natural, causada por fatores biológicos, físicos, etc... Os principais contaminantes podem ser classificados da seguinte maneira (Cárdenas, 1974):

- 1 - Biodegradáveis - elementos orgânicos que requerem oxigênio, normalmente medidos em termos de DBO.
- 2 - Bacteriais - elementos infecciosos, tais como bactérias, vírus e parasitas. Em geral, os níveis padrões de concentração são expressos em termos de número provável de contaminantes bacteriais por 100 mililitros de água.
- 3 - Substâncias conservativas - contaminantes como as substâncias químicas e elementos não-degradá-

CONSTITUINTES DOS DESPEJOS	PROBLEMAS RELACIONADOS COM A QUALIDADE E USO DA ÁGUA
Sólidos Totais Dissolvidos	Suprimento Industrial Suprimento Doméstico Agricultura
Temperatura	Oxigênio Dissolvido, Balanço Aquático
DBO Carbonácea DQO Carbono Total	Oxigênio Dissolvido, Nutrientes
Nitrogênio Orgânico	Oxigênio Dissolvido, Nutrientes
Amônia	Oxigênio Dissolvido, Nutrientes
Nitrito e Nitrato	Oxigênio Dissolvido Nutrientes Suprimento de Água
Fosfato	Nutrientes
Metais Tóxicos Inorgânicos	Suprimento de Água, Cadeia Alimentar
Orgânicos Tóxicos	Suprimento de Água, Cadeia Alimentar
Bactérias	Suprimento de Água, Uso Recreacional
Vírus	Suprimento de Água, Uso Recreacional
Substâncias Flotantes	Uso Recreacional
Sólidos em Suspensão	Uso Recreacional, OD, Nutrientes, Limitações de Luz
Cor e Turbidez	Uso Recreacional, Limitações de Luz

TABELA I.1 - Relação entre Constituintes, Qualidade e Uso da  
Água (O'Connor et alii, 1971)



veis, como, por exemplo, os íons metálicos e as substâncias radioativas de longa meia-vida. São medidas através de sua concentração.

- 4 - Sedimentos - sólidos em suspensão, encontrados em águas residuais.
- 5 - Térmicos - Problema criado pela temperatura associada à água residual, principalmente aquela utilizada para resfriamento de sistemas de geração de energia elétrica.
- 6 - Eutrofização do corpo d'água - fenômeno causado pelo "envelhecimento" de um depósito de água e se origina devido à excessiva concentração de nutrientes, particularmente, nitrogênio e fósforo, que estimulam o excessivo crescimento de plantas aquáticas. É medido em termos do potencial de crescimento dessas plantas.

A contaminação das águas pode se apresentar das mais variadas formas e, os agentes causadores agindo, isoladamente ou em conjunto, dificultam a escolha de um critério que caracterize o grau de purificação de um rio. Tem-se notado porém, que o crescente aumento industrial e populacional, acarreta um aumento substancial de despejos orgânicos - rejeitos industriais resultantes de processos produtivos e esgotos domésticos - resultando ser, esta forma de poluição, uma das mais significativas.

Quando despejos não-tratados são descarregados num rio, o equilíbrio dinâmico entre os componentes biológicos, químicos e físicos do ambiente sofrem perturbações, isto é, o balan-

ço natural é afetado.

Para avaliar o estado presente e futuro da vida aquática, os efeitos no crescimento de algas e bactérias, os níveis de poluição aceitáveis, a "habilidade" de um corpo d'água em obter oxigênio da atmosfera, entre outros fatores, a concentração de Oxigênio Dissolvido (OD) e a Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) são comumente usados para caracterizar a qualidade da água. Na verdade, elas estão entre as variáveis vitais, as quais, determinam se um rio pode ou não, ser considerado poluído.

Um instrumento bastante eficaz para o estudo de níveis atuais e futuros de poluição, e que possibilita o estudo das soluções para o problema, tem sido os modelos matemáticos de qualidade de água que, na sua maioria, representam a distribuição espacial e temporal da concentração de OD e DBO, baseados nas relações entre fontes e consumidores de oxigênio.

Para que esses modelos representem, satisfatoriamente, os fenômenos naturais, faz-se necessária a escolha de parâmetros, que pertencentes ao modelo, permitam obter menores diferenças entre os valores calculados e aqueles obtidos no campo.

Após uma estimativa inicial, os valores desses parâmetros podem ser melhorados heurísticamente, o que, na maioria das vezes, não fornece resultados satisfatórios. Vem daí a necessidade de se tentar usar técnicas mais aprimoradas, no que tange à calibração do modelo.

Um procedimento bastante simples e eficaz, que vem sendo utilizado com sucesso na identificação de parâmetros, é a

técnica de Quasilinearização. Essa será a técnica utilizada nesse trabalho.

## I.2. Objetivos

O presente estudo, compreende uma análise de qualidade da água de um rio, incluindo a escolha de um modelo matemático, entre os existentes, para esta finalidade, e a apresentação de uma metodologia de calibração do modelo através de parâmetros selecionados.

O modelo adaptado para este trabalho foi o QUAL-II/SEMOG - Simulation of Water Quality in Streams and Canals (Roesner et alii, 1977). O modelo é aplicável a escoamentos unidimensionais, assumindo que os mecanismos de transporte (advecção e dispersão) são significativos apenas no sentido longitudinal do rio ou canal.

No modelo, o esquema numérico implícito regressivo de diferenças finitas, é utilizado para solucionar as equações diferenciais parciais parabólicas de 2ª ordem.

Antes da calibração será feita uma análise de sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros:  $K_1$  (coeficiente de desoxigenação),  $K_2$  (coeficiente de reaeração) e  $K_3$  (coeficiente de sedimentação) com a finalidade de testar e associar características específicas do comportamento do sistema em relação a esses parâmetros de maior interesse. Esta caracterização dos parâmetros torna-se de grande importância na validação da estrutura

do modelo, e serve como análise prévia à calibração automática.

Para a calibração do modelo será utilizado o método de QUASILINEARIZAÇÃO, originalmente desenvolvido por Bellman e Kalaba (1965). Consiste num método sistemático que inicia por solucionar uma série de sub-problemas lineares com o propósito de que suas soluções convirjam à solução do problema original. Esta técnica não se limita à identificação dos parâmetros em equações lineares, mas também é aplicável a uma grande variedade de problemas não-lineares.

Visando mostrar uma aplicação de metodologia proposta, foram obtidos dados através da CETESB-SP, que fazem parte de um inventário da qualidade da água do Rio Atibaia (1981) desenvolvido por este órgão.

Foram simulados os seguintes constituintes: OD, DBO carbonácea, Nitrificação (Amônia, Nitrito e Nitrato), Fósforo e Coliformes Fecais.

Por não se dispor de dados, não foram considerados: Temperatura, Algas (fotossíntese e respiração), Materiais Conservativos e Radioativos.

Na fase de calibração serão utilizados os dados referentes à campanha de agosto de 1977. Foi selecionado esse conjunto de dados por apresentar menores valores de vazão e por ser esta, a condição crítica, no tocante à qualidade de corpos d'água.

### I.3. Apresentação do Trabalho

No capítulo II, são apresentados os fatores relevantes na análise da qualidade da água, abrangendo observações quanto às variações sofridas por um poluente, decorrentes de fatores hidrodinâmicos, reações físicas, químicas e biológicas. São, ainda, apresentados os parâmetros envolvidos no modelamento de cada constituinte estudado e feita uma rápida revisão bibliográfica sobre os mesmos.

Os modelos pesquisados, durante o desenvolvimento do trabalho, são referenciados e discutidos no capítulo III.

No capítulo IV, a calibração e a validação de um modelo matemático, são discutidos e é introduzido o método automático de Quasilinearização. É ainda apresentado, detalhadamente, o algoritmo para o método em questão.

O modelo QUAL-II/SEMCOG é exposto, detalhadamente, no capítulo V. São discutidas as suas limitações, suas equações básicas, e os constituintes que simula. A solução numérica utilizada na resolução das equações é mostrada, assim como o cálculo dos parâmetros necessários ao modelo, os resultados obtidos através de sua aplicação e a técnica de Quasilinearização utilizada para calibrá-lo.

A descrição da aplicação do método a uma situação hipotética e o programa computacional desenvolvido para tal, são focalizados no capítulo VI.

No capítulo VII, é descrita a aplicação feita utilizando o QUAL-II/SEMCOG e dados referentes ao Rio Atibaia, escolhidos para a fase de calibração do modelo.

No capítulo VIII é apresentada a discussão dos resultados finais e no capítulo IX, as conclusões do trabalho e recomendações para utilizações futuras.

## CAPÍTULO II

## II. FATORES RELEVANTES NA ANÁLISE DA QUALIDADE DA ÁGUA

Entre os vários constituintes dos despejos municipais e industriais, que lançados na água, afetam a sua qualidade, destacam-se os conservativos ou não-degradáveis, os não-conservativos, as bactérias e os poluentes térmicos.

Nesse capítulo, será enfocado, com mais detalhe, o modo com que esses materiais se comportam no corpo d'água, isto é, como são afetados e como respondem a variações nos fatores hidrodinâmicos e a reações físicas, químicas e biológicas.

Nesse contexto, também será discutida a importância e estimativa dos parâmetros envolvidos no modelamento de cada constituinte.

## II.1. Aspectos Gerais na Variação de um Poluente em Cursos de Água

As variações observadas na concentração de qualquer contaminante em rios ou canais abertos, é o resultado de uma série de fatores hidrodinâmicos e reações físicas, químicas e biológicas, que interagem e influem no comportamento do material ao longo destes corpos d'água.

Sendo um fenômeno natural, esta variação se processa tri-dimensionalmente; entretanto obtem-se uma boa aproximação,

considerando-se que a concentração na seção transversal se mantém uniforme e que o processo se dá ao longo do eixo longitudinal da corrente.

A análise é usualmente baseada na equação unidimensional de continuidade e é uma expressão do princípio da conservação da massa, O'Connor (1967) e Di Toro (1969):

$$\frac{\partial C}{\partial t} (x, t) = \frac{1}{A(x)} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_L(x) A(x) \frac{\partial C}{\partial x} (x, t) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ Q(x, t) \cdot C(x, t) \right] \right\} \pm S(C, x, t) \quad (\text{II.1})$$

onde:

$t$  = tempo,

$x$  = distância na direção longitudinal,

$C(x, t)$  = concentração do material (conservativo ou não) na distância  $x$  e no tempo  $t$ ,

$A(x)$  = área da seção transversal para uma certa vazão na direção  $x$ ,

$D_L(x)$  = coeficiente de dispersão longitudinal em  $x$ ,

$Q(x, t)$  = vazão em  $x$  no tempo  $t$ , e

$S(C, x, t)$  = somatório das taxas de acréscimo (fonte) ou decréscimo (consumidor) de concentração do material em  $x$  no tempo  $t$ .

Sob a hipótese de regime hidráulico permanente; isto é, considerando que para um dado trecho, a vazão, o coeficiente de dispersão longitudinal,  $D_L$ , e a área da seção, não variam com



o tempo, a equação (II.1) fica reduzida a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_1 - \underbrace{u \cdot \frac{\partial C}{\partial x}}_2 \pm \underbrace{\Sigma S}_3 \quad (\text{II.2})$$

onde:

- 1 - componente dispersivo da concentração;
- 2 - componente advectivo, e
- 3 - fontes e retiradas do material em questão.

## II.2. Transporte Hidrodinâmico de Materiais Conservativos: Difusão e Advecção

A concentração de um poluente conservativo em um rio depende, primariamente, dos fenômenos do transporte hidrodinâmico, a saber: advecção e difusão.

A advecção é o transporte resultante do movimento do fluido no sentido do escoamento e a difusão é o processo que sofre a substância em solução devido ao gradiente de concentração.

Se uma massa de material solúvel é descarregada numa corrente, ela irá mover-se para jusante acompanhando o fluxo, inicialmente como uma massa concentrada; após algum tempo, ela se dispersará sofrendo um aumento de tamanho, e um decréscimo na sua concentração. Quando o rio ou canal é relativamente estreito, este fenômeno acontece na direção longitudinal do fluxo, sendo denominado dispersão longitudinal.

O mecanismo básico causador da dispersão é o gradiente de velocidade em diferentes pontos da seção transversal e o efeito da difusão turbulenta.

A distribuição de uma massa de material conservativo descarregada num fluxo turbulento é governado por uma equação baseada na lei da conservação da massa, e, tridimensionalmente, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C'}{\partial t} + u \frac{\partial C'}{\partial x} + v \frac{\partial C'}{\partial y} + w \frac{\partial C'}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial C'}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial C'}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial C'}{\partial z}) \quad (\text{II.3})$$

onde:

$C'$  = concentração local instantânea do material,

$x, y, z$  = coordenadas espaciais nas direções longitudinal, lateral e vertical,

$u, v, w$  = componentes de velocidade nas direções  $x, y, z$ ,

$t$  = tempo desde a injeção, e

$D_x, D_y, D_z$  = coeficientes de difusão turbulenta, em  $x, y, z$ .

Para o caso uni-dimensional, com coeficiente de dispersão longitudinal constante, ( $D_x = D_L$ ), a equação para concentração média,  $\bar{C}$ , numa seção, poderá ser descrita como:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \quad (\text{II.4})$$

onde:

$\bar{u}$  = velocidade média de fluxo numa seção, assumida ser independente do tempo.

Considerando as seguintes hipóteses:

1. A velocidade de fluxo  $V$  é independente do tempo e o fluido é incompressível,
2. A densidade do soluto é igual à da água,
3. O coeficiente  $D_L$  é constante, e
4. A mistura é uniforme e a concentração média,  $\bar{C} = C$ , depende somente de  $x$  e  $t$ ,

a equação (II.4), substituindo  $\bar{u}$  por  $V$ , fica reduzida a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{II.5})$$

A solução analítica da equação (II.5), para uma descarga pontual num plano  $x=0$  e num tempo  $t=0$ , é conhecida e pode ser escrita como:

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_L t}} \cdot \exp \left( - \frac{(x - Vt)^2}{4 D_L t} \right) \quad (\text{II.6})$$

onde:

$M$  = massa do material conservativo, e

$A$  = área da seção transversal, normal a  $x$ .

De acordo com essa solução, a distribuição do material com a distância, em qualquer tempo, é representada por uma curva normal. Entretanto a curva tempo  $\times$  concentração não é normal, uma vez que o denominador da equação varia com  $t$ .

As condições iniciais e de contorno, que satisfazem a equação (II.6), são as seguintes:

$$C(x, 0) = 0 \quad \text{para } x > 0 \quad (\text{II.7})$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(x) C(x, t) dx = M \quad \text{para todo } t \quad (\text{II.8})$$

$$C(\infty, t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0 \quad (\text{II.9})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow 0 \quad \text{para } t \rightarrow \infty \quad (\text{II.10})$$

Vários autores tem proposto modelos para reproduzir as variações na concentração de materiais conservativos e estimativas para o coeficiente de dispersão longitudinal,  $D_L$ , a partir das características hidráulicas do rio.

Hays (1966), Tackston e Schnelle (1970) e Valentine e Wood (1979), foram alguns dos que propuseram considerar os efeitos de armazenamento temporário do material em "zonas mortas" em adição à mistura causada por turbulência e gradiente de velocidade.

As equações propostas para estimar o coeficiente de dispersão longitudinal foram obtidas para determinadas condições de fluxo e seções características e, ainda, levando-se em conta os principais fatores influentes no valor de  $D_L$ : forma da seção transversal, velocidade e profundidade média. Algumas dessas equações são mostradas na Tabela II.1 (Bansal, 1971).

Na literatura específica encontram-se ainda outros trabalhos, de campo e de laboratório, alguns utilizando traçadores radioativos e fluorescentes para simular esses materiais. O grande número de pesquisas na área demonstra a importância, no controle de poluição, do conhecimento da taxa com que os mate-

INVESTIGADORES	EQUAÇÕES
TAYLOR (1954) CONDUTO FORÇADO	$D_L = 10,11 \cdot u_* \cdot R$
ARIS (1956)	$D_L/u_* \cdot R = \text{constante}$
PARKER (1961) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 14,28 (2 \cdot g \cdot S)^{1/2} \cdot R^{3/2}$
SAFFMAN (1962)	$D_L/u_* \cdot H = \text{constante}$
CEDERWALL (1967)	$D = (u'^2)^{1/2} \cdot \ell$
GLOVER (1964) CORRENTES NATURAIS	$D_L = 500 \cdot u_* \cdot H$
ELDER (1959) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 5,93 \cdot u_* \cdot H$
THOMAS (1958) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L/u_* \cdot H = \left(\frac{\bar{u}}{u_*}\right)^3 \cdot \phi(n) + \frac{u_*}{\bar{u}} \cdot \psi(n)$
YOTSUKURA E FIERING (1964) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 13,0 \cdot u_* \cdot H$
FISHER (1967) CORRENTES NATURAIS	$D_L = -\frac{1}{A} \iint_A u'' \int_0^Y \frac{1}{\epsilon y} d(y) \left[ \int_0^y \int_0^d u'' dz dy \right] dy dA$
LEVENSPIEL E SMITH (1966)	$D_L = \frac{\bar{u}}{8} \cdot \left[ (8 \cdot \sigma^2 + 1)^{1/2} - 1 \right] \cdot L'$
KRENKEL (1962) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 9,1 \cdot u_* \cdot H$
HAYS (1966) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 6,39 \cdot H^{1,24} \cdot E^{0,3}$
KOLMOGOROFF (1941) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = C \cdot L_a^{4/3} \cdot E^{1/3}$
TACKSTON (1966) CORRENTES NATURAIS	$D_L = 7,25 u_* \cdot H \cdot \left(\frac{\bar{u}}{u_*}\right)^{1/4}$
SOOKY (1969) FLUXO EM CANAL ABERTO	$D_L = 0,222 \cdot \frac{u_* \cdot H_m}{k^3 \cdot a} \cdot \alpha + \frac{a}{9} \cdot k u_* \cdot H_m + \frac{1}{9} k \cdot u_* \cdot H_m$

TABELA II.1 - Equações Empíricas para Cálculo de  $D_L$ . (Bansal, 1971).

riais conservativos se dispersam e que mecanismos causam essa dispersão.

Para obter-se valores confiáveis para o coeficiente de dispersão, faz-se necessário reunir a escolha de um modelo adequado para o caso e realizar experiências de campo em diferentes trechos do rio. Esse procedimento deverá considerar o alto custo envolvido nessas medidas de campo, a não disponibilidade de uma equação confiável, como alternativa para essas medidas e, ainda, a grande variabilidade de modelos propostos.

Um relevante trabalho, reunindo esses dois fatores essenciais, foi desenvolvido por Patterson e Gloyna (1965), que utilizaram traçadores fluorescentes para medir dispersão longitudinal e transversal e propuseram uma fórmula empírica desenvolvida a partir de dados obtidos em canais.

Faz-se necessário também, após a obtenção dos dados e a aplicação do modelo escolhido, a utilização de alguma técnica disponível para calibrar esse modelo; ou seja, dada a possível inconsistência dos valores obtidos para  $D_L$ , o que pode acarretar consequente distorção do fenômeno real, torna-se imprescindível a consecução de um valor para esse coeficiente, tal que, quando inserido no modelo, reproduza, o mais próximo possível, os valores obtidos no campo.

Entre os trabalhos mais recentes sobre dispersão em canais abertos, podem ser destacados:

Harden e Shen (1979), que compararam resultados obtidos a partir de um modelo numérico, resultados analíticos e de medidas de campo;

Beltaos (1980), que sugeriu uma análise mais elaborada do fenômeno, propondo um modelo baseado em dois novos parâmetros:  $\beta$  (coeficiente adimensional) e L (comprimento característico do rio); e

Chatwin (1980), que analisou dados de dispersão longitudinal de certos fluxos em ambientes naturais e em laboratório. Baseado no fato de que a descrição de dados de dispersão longitudinal é comumente feita assumindo-se que a concentração do material obedece à equação da difusão, ele examinou os métodos existentes e de acordo com essa revisão, propôs meios alternativos para classificar esses dados.

### II.3. Mecanismos de Reação de Materiais Não-Conservativos

O conhecimento dos vários constituintes não-conservativos de despejos, sua forma de reação e comportamento no corpo d'água, são dados de grande importância no estudo da qualidade da água. Na bibliografia corrente, eles são agrupados em duas principais categorias: fontes e consumidores de oxigênio, e serão tratados, dessa forma, nas seções seguintes.

### II.3.1. Oxigênio Dissolvido (OD) como Indicador de Poluição

A quantidade de efluentes biodegradáveis (forma mais significativa de poluição atualmente) que um rio ou canal pode assimilar, depende do suprimento de OD que as bactérias requerem para decompor a matéria orgânica. Essa é uma das causas pelas quais se faz uso do OD como indicador da qualidade de água.

De uma forma quantitativa, o oxigênio não somente indica, mas também controla o estado de auto-depuração de um corpo d'água. (Thomas, 1948).

Vários são os fatores que influem na concentração do OD. Segundo O'Connor (1967), estes fatores podem ser agrupados em duas categorias. A primeira inclui características geofísicas da área de drenagem, tais como vazão, geomorfologia da corrente e a temperatura da região. A segunda cobre fatores bioquímicos e físicos da própria corrente, que relacionam fontes e consumidores, naturais ou artificiais, de OD.

Entre os fatores de consumo, podem ser citados alguns, como: respiração de bactérias, peixes e algas, depósitos bênticos, biodegradação da matéria orgânica carbonácea e nitrogenada, contaminação orgânica trazida pelos tributários, salinidade, aumento de temperatura acarretando decréscimo da solubilidade do oxigênio e aumentando o metabolismo microbiológico, concentração excessiva de nutrientes (fósforo e nitrogênio) levando a grande proliferação de plantas aquáticas, arraste do material de depósitos de fundo, etc...



Entre as principais fontes de OD podem ser assinaladas as seguintes: reaeração atmosférica (natural e artificial, produção fotossintética (principalmente das algas), diluição decorrente de tributários não-poluídos, sedimentação da matéria orgânica, diminuição da temperatura, etc...

Sendo diversos os fatores que influem na qualidade da água e também os tipos de poluentes e os efeitos que causam, fica difícil escolher um critério para avaliar o nível da qualidade do corpo d'água em questão. Por esta razão são fixados níveis admissíveis para os constituintes, pré-tratamento para os efluentes e, ainda, são tentadas medidas tais como reaeração artificial e aumento extra de fluxo, que funciona como vazão de diluição para aumentar o OD.

O nível mínimo fixado para o OD (de acordo com a Legislação Básica da SEMA) é 4mg/l, devido a ser essa a concentração considerada mínima viável para manutenção da flora e da fauna em rios e canais.

### II.3.2. Fatores Influentes na Concentração de Oxigênio Dissolvido na Água.

#### II.3.2.1. Demanda Bioquímica Carbonácea

A Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) é utilizada como medida da quantidade de oxigênio requerido para oxidação da matéria orgânica biodegradável presente na água, por ação bioquímica aeróbica e/ou anaeróbica.

A DBO de despejos é exercida por três classes de materiais: (1) materiais orgânicos carbonáceos utilizados como fonte de alimento por organismos aeróbicos, (2) compostos orgânicos nitrogenados que servem de alimento para bactérias específicas, tais como, Nitrossomonas e Nitrobactérias (este tipo de oxidação é discutido na seção II.3.2.2) e (3) compostos químicos, como o íon  $F_e^{++}$ , que são oxidados pelo oxigênio dissolvido.

Para esgotos domésticos, geralmente toda a DBO é devida à oxidação de materiais orgânicos carbonáceos, daí a importância desse fator como indicador da qualidade de corpos receptores.

A DBO é analisada em laboratório segundo vários procedimentos; um deles é feito utilizando-se a diluição das amostras e é descrito, sucintamente, a seguir:

1 - Preparam-se várias diluições da amostra a ser analisada, com água destilada de alta pureza. As diluições recomendadas dependem da concentração estimada dos contaminantes responsáveis pela demanda.

2 - Deverão ser utilizadas garrafas de incubação de 250 a 300 ml. Nas garrafas de DBO deverão ser colocados:

- a amostra diluída, ou seja, o substrato,
- uma pequena porção de microorganismos (usualmente o líquido sobrenadante de esgoto doméstico), e
- solução nutriente para os microorganismos, que deverá conter fósforo e nitrogênio.

Para cada garrafa de DBO é preparada uma garrafa de controle, a qual não contém o substrato.

3 - As garrafas são incubadas a uma temperatura de  $20^{\circ}\text{C}$ . A cada período de 24 horas, uma garrafa de DBO e sua garrafa de controle correspondente, são retiradas do incubador e o DBO, de ambas, é determinado. A diferença entre as concentrações de OD(mg/l) da garrafa de controle e da garrafa de amostra corresponderá ao oxigênio utilizado na oxidação bioquímica dos contaminantes.

São plotados valores de  $y$  (DBO em mg/l), igual ao OD (controle) menos o OD(amostra), versus o tempo de incubação  $t$  (dias).

Uma curva típica de DBO para oxidação de materiais carbonáceos é apresentada na Figura II.1 (Ramalho, 1977).

A utilização de oxigênio no teste de DBO é muito lenta. A curva mostrada somente atinge o limite em torno de 20 dias ou mais. Esse valor é denominado DBO último e denotado por  $\text{DBO}_u$ .

Devido à importância do fator tempo, envolvido no teste, torna-se impraticável, a sua execução contínua. Na prática, a DBO é tomada em 5 dias e esse valor é denominado  $\text{DBO}_5$ .

A razão de  $\text{DBO}_5$  para  $\text{DBO}_u$  também varia, dependendo do substrato. Para esgoto doméstico essa relação é aproximadamente igual a 0,77 (Ramalho, 1977).

Os primeiros a analisarem a desoxigenação da matéria orgânica foram Streeter e Phelps (1925) considerando uma reação cinética de primeira ordem; isto é; a taxa de remoção,  $K_1$ , seria proporcional à concentração remanescente do substrato. Essa taxa depende da natureza do despejo, da temperatura e das condições físicas, químicas e biológicas do meio:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = - K_1 \cdot L \quad (\text{II.11})$$

onde:

$K_1$  = taxa de desoxigenação, base e ( $\text{dia}^{-1}$ ), e

$L$  = DBO a ser satisfeita ( $\text{mg}/\ell$ )

Deininger (1973) em estudos relativos à equação (II.11), considerou que a DBO total seria o resultado de ambas demandas, carbonácea e nitrogenada, e propôs a soma das duas para representar a totalidade da demanda, sugerindo a equação:

$$K_1 \cdot L = K_{1C} L_C + K_{1N} \cdot L_N \quad (\text{II.12})$$

onde:

$L_C$  e  $L_N$  = DBO carbonácea e nitrogenada a serem satisfeitas ( $\text{mg}/\ell$ ), e

$K_{1C}$  e  $K_{1N}$  = taxas de desoxigenação carbonácea e nitrogenada ( $\text{dia}^{-1}$ )

Vários são os autores que têm pesquisado a DBO carbonácea e sua inclusão nos modelos de qualidade de água; entre outros, figuram Streeter-Phelps (1925), Thomas (1948); Camp (1965); O'Connor (1967); Bella e Dobbins (1968); Rinaldi et alii (1979) e King (1980).

A taxa de desoxigenação carbonácea,  $K_{1C}$ , pode ser obtida pela tangente à curva (Figura II.1) para um certo tempo de incubação.

A diferença entre os valores do coeficiente  $K_{1C}$ , obtidos no campo e em testes padrões em laboratório é devida, primariamente, à variabilidade das características físicas e bioquímicas dos dois ambientes.

Thomas (1948) foi o primeiro a introduzir esse conceito e sugeriu que a taxa deveria ser definida como uma soma do coeficiente obtido no laboratório e um coeficiente adicional que deveria incluir efeitos, tais como sedimentação e arraste. Além desses fatores, essa diferença também é atribuída ao crescimento biológico no leito do rio, nutrientes, turbulência, etc...

Em decorrência da variabilidade dos fatores que afetam a DBO carbonácea, e por isso, a incerteza na estimativa de  $K_{1C}$ , esse parâmetro deve receber especial atenção, quando, inserido em modelos de qualidade de água.

Wright e Mc Donnell (1979) desenvolveram relações empíricas entre  $K_{1C}$  e as características hidráulicas do canal. Recomendamos as seguintes equações para estimar o coeficiente de desoxigenação, associado à oxidação biológica devido à DBO carbonácea:

$$K_{1C} = 10,3 \cdot Q^{-0,49} \quad (\text{II.13})$$

onde:  $Q$  = fluxo permanente da corrente ( $\text{m}^3/\text{s}$ ).

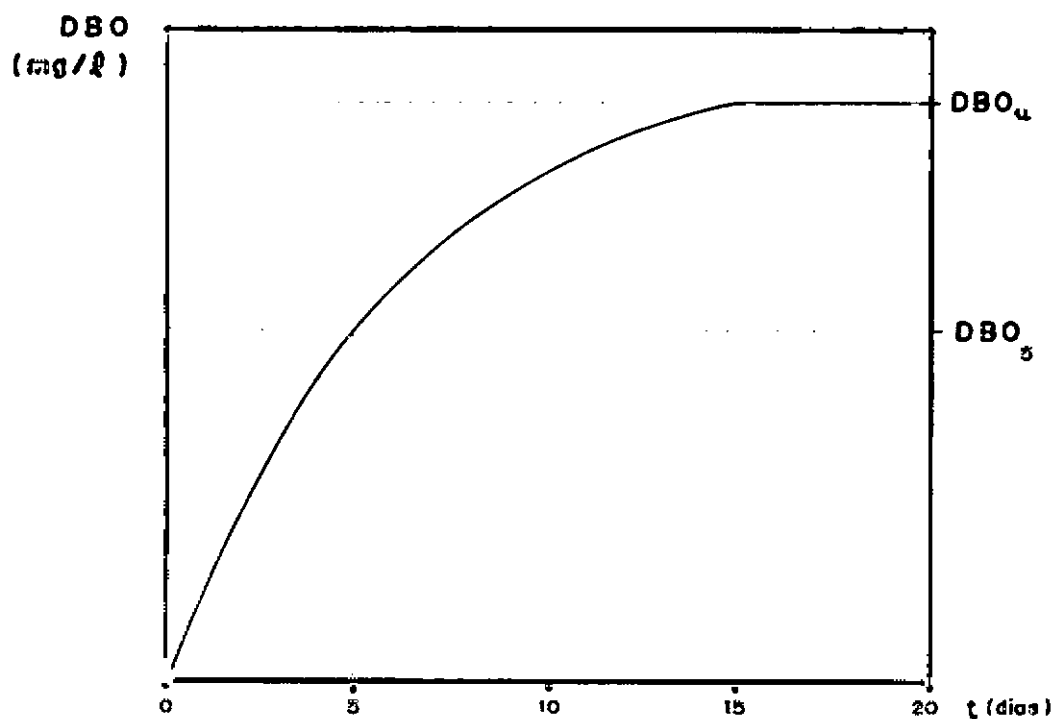


FIG. II.1 - CURVA TÍPICA DE DBO CARBONÁCEA. ( Romalho, 1977 )

alternativamente:

$$K_{1C} = 39,6 \cdot P^{-0,84} \quad (\text{II.14})$$

onde: P = perímetro molhado (m).

Além de apresentar uma metodologia aceitável para estimar essa taxa, em relação aos métodos disponíveis (Mínimos Quadrados, da Inclinação, dos Momentos, etc...), pode ser utilizada, efetivamente, em situações nas quais restrições econômicas impedem extensas coletas de campo.

#### II.3.2.2. Nitrificação - Demanda Bioquímica Nitrogenada

Além da oxidação de materiais carbonáceos num corpo d'água, observa-se também a oxidação de materiais nitrogenados quando a incubação se processa num período de tempo suficientemente longo.

A oxidação nitrogenada também demanda oxigênio e é observada, como um segundo estágio, em testes longos de Demanda Bioquímica de Oxigênio. Este fenômeno é denominado NITRIFICAÇÃO.

As quatro formas de Nitrogênio, mais importantes, que tomam parte neste fenômeno, são: Nitrogênio Orgânico (por exemplo, proteínas), Amônia ( $\text{NH}_3$ ), Nitrito ( $\text{NO}_2$ ) e Nitrato ( $\text{NO}_3$ ).

Todas as formas indicadas podem ser descarregadas através de despejos industriais ou municipais. A Amônia e o Nitrogênio orgânico, entretanto, são as formas mais comuns em despejos municipais.

Antigamente, a oxidação da Amônia a Nitrato, constituía um dos maiores objetivos do tratamento de esgotos, porém, com o desenvolvimento do teste da Demanda Bioquímica de Oxigênio, esse parâmetro foi relativamente negligenciado. (Branco e Rocha, 1977).

O controle da poluição nas águas receptoras depende, em grande parte, da oxidação da Amônia e do Nitrogênio Orgânico.

Nas águas brutas, destinadas a servir de manancial de água potável, o Water Quality Criteria (1968) recomenda, para a Amônia, o limite máximo de 0,5 (em N) mg/l, constituindo concentração ideal a manutenção de teores menores do que 0,01 mg/l. A Portaria/GM/Nº 0013 da SEMA, estabelece para o Brasil, para águas de classe 2 e 3, um teor máximo de 0,5 mg/l.

Os Nitratos ocorrem naturalmente na água, em baixas concentrações, como produtos de estabilização aeróbica de matéria orgânica nitrogenada. Concentrações mais elevadas ocorrem por estabilização de esgotos, drenagem de áreas fertilizadas ou, ainda, oxidação da Amônia de origem industrial.

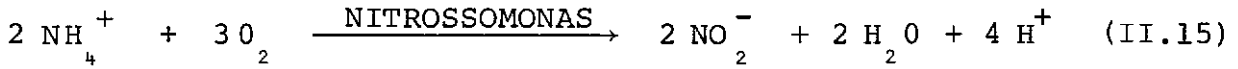
A SEMA estabelece, tanto para águas classe 2 quanto para classe 3, os seguintes teores máximos: Nitrato, 10 mg/l de N e Nitritos, 1 mg/l de N.

Segundo Ramalho (1977), o fenômeno de Nitrificação se processa em duas etapas:

1. O Nitrogênio orgânico, quando descarregado no corpo d'água, sofre uma reação (hidrólise) resultando como produto



final, a Amônia. Esta, por sua vez, é oxidada sob condições aeróbicas na presença de bactérias (Nitrossomonas) dando origem ao Nitrito, como segue:



2. O Nitrito formado é subsequentemente oxidado a Nitrato na presença de microorganismos (Nitrobactérias), como segue:



Nota-se, nas duas reações bioquímicas acima, a utilização do Oxigênio como parte indispensável nas mesmas, daí a certeza de ser a Nitrificação, uma fonte potencial da depleção de oxigênio em águas naturais.

O fenômeno da Nitrificação é ilustrado nas Figuras II.2 e II.4.

Se a sequência de reações é admitida ininterrupta, a Amônia decai quase exponencialmente, e o Nitrito cresce, sendo, porém, rapidamente oxidado a Nitrato. Eventualmente, toda a Amônia original é convertida, bacteriologicamente, a Nitrato.

Existem vários fatores que podem modificar a sequência das reações. Sob condições de baixos teores de Oxigênio Dissolvido, a Nitrificação é inibida e, para valores próximos de zero, a Nitrificação é totalmente suprimida.

Para propósitos práticos, a Nitrificação pode ser as sumida nula para níveis de Oxigênio Dissolvido abaixo de 1,5 mg/l ou para temperaturas menores que 10°C (O'Connor et alii, 1972). Entretanto, tão logo o corpo d'água se recupere, a Nitrificação causará uma curva de Oxigênio secundária, como podemos observar na Figura II.3 (Ramalho, 1977).

A figura II.3 ilustra os 2 estágios em que se processsa a DBO. O primeiro é atribuído à oxidação da parte carbonácea da matéria orgânica e o segundo reflete a utilização de oxigênio na oxidação de compostos orgânicos nitrogenados e amoniacais.

Nota-se aí que se uma translação dos eixos coordenados é feita, terá origem um novo sistema de eixos, tal que a sua origem coincide com o ponto C (Sistema  $\Delta_y \times t'$ ); logo teremos a curva para a DBO nitrogenada, como sendo:

$$\Delta_y = L_N \cdot (1 - 10^{-K_{1N} t'}) \quad (t > t_c) \quad (\text{II.17})$$

onde:

$K_{1N}$  = taxa constante de remoção de DBO nitrogenada

Assim como  $K_{1C}$ ,  $K_{1N}$  também é estimado em testes padrões de laboratório, utilizando-se, porém, um tempo maior de incubação. Devido ser calculado a partir de experiências controladas, o seu valor, na maioria das vezes, não será exatamente igual ao de campo, devendo sofrer correções e ajustes.

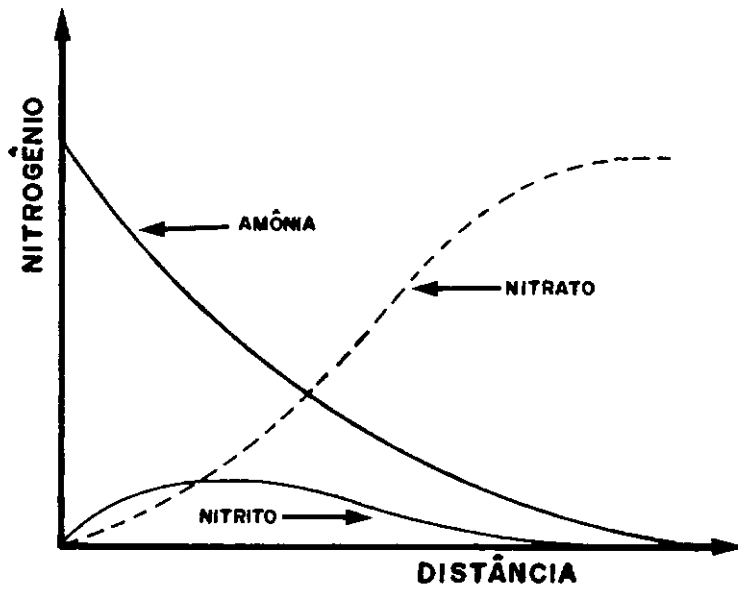


FIG. II.2 - REAÇÕES SEQUENCIAIS DA NITRIFICAÇÃO. ( O'Connor et alii, 1971 )

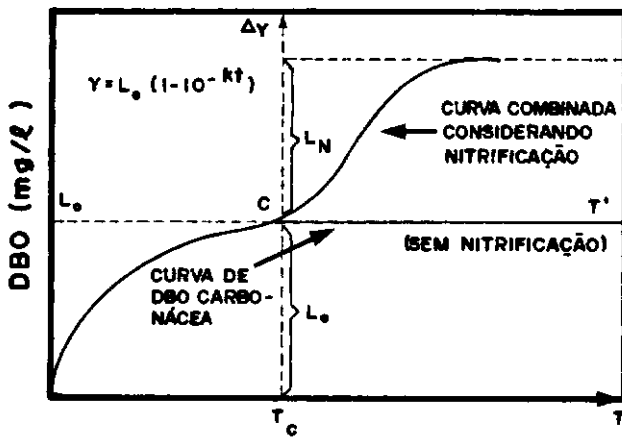


FIG. II.3 - DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXIGÊNIO ( CARBONÁCEA E NITROGENADA )  
( Ramalho, 1977 )

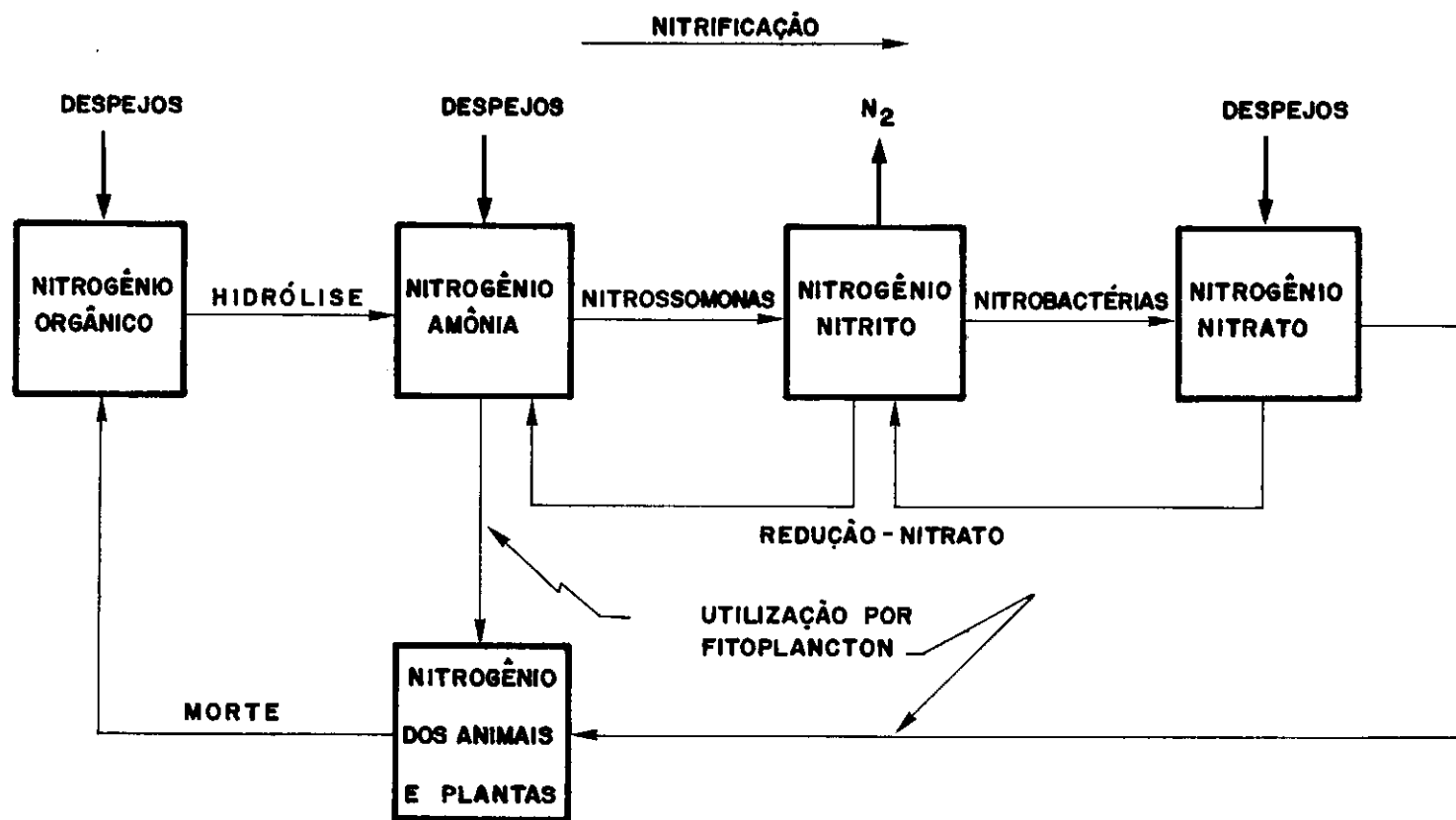


FIG. II.4 - CICLO DO NITROGÊNIO. ( O'connor et alii, 1973 )

### II.3.2.3. Reaeração

A reaeração, como fonte substancial de oxigênio num corpo d'água, pode ser explicada da seguinte maneira: a água da superfície livre, do rio ou canal, encontra-se saturada de oxigênio devido ao contato com a atmosfera; o contrário acontece, a medida que aumenta a distância abaixo dessa superfície. Isso resulta num gradiente de concentração de OD, o qual, por difusão, é levado da camada de maior concentração para o interior do corpo d'água. A turbulência gerada nos contornos do rio cria uma intensa agitação, que causa um intercâmbio contínuo entre o fluido na superfície e no interior da água. Tal intercâmbio aumenta a taxa de absorção de oxigênio pela superfície livre e subsequente difusão para o interior do corpo d'água.

Esse fenômeno constitui uma das fontes mais significativas de oxigênio e, segundo Krenkel e Orlob (1962), é influenciado por vários fatores, a saber: déficit de oxigênio (a taxa de reaeração é proporcional ao déficit a uma dada temperatura), características físicas e hidráulicas do rio (relação área/volume), temperatura (diminui a solubilidade do oxigênio da água), difusão turbulenta, tempo de contato, difusibilidade molecular, entre outros.

O primeiro trabalho significativo na área, (Adeney e Becker, 1919) e a literatura específica existente, confirmam que  $K_2$ , coeficiente de reaeração, é proporcional ao déficit de saturação de oxigênio a uma dada temperatura, e que a relação é da forma:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = - K_2 \cdot D \quad (\text{II.18})$$

onde:

$D$  = déficit de oxigênio (mg/l);

$K_2$  = coeficiente de reaeração ( $\text{dia}^{-1}$ ), e

$$- \frac{\partial D}{\partial t} = K_2 (C_s - C_t) \quad (\text{II.19})$$

onde:

$C_s$  = concentração de saturação de oxigênio na água (mg/l),

e

$C_t$  = concentração de oxigênio no tempo  $t$  (mg/l).

A concentração de saturação de oxigênio é função da temperatura, da salinidade e da pressão barométrica. À temperatura de  $20^\circ\text{C}$ , temos  $C_s = 9,2 \text{ mg/l}$  (Ramalho, 1977).

Streeter e Phelps (1925), pesquisando vários coeficientes de reaeração ( $K_2$ ), corrigidos a uma dada temperatura, para vários trechos de rio e sob vários regimes de fluxo, verificaram que as condições que causavam variações em  $K_2$  eram mais uniformes em diferentes seções sujeitas a condições similares de fluxo do que em um único trecho sujeito a diferentes fluxos. Isto indicava que aqueles fatores físicos que variavam com a vazão eram mais influentes na taxa de reaeração e concluíram que os fatores mais significativos eram a profundidade e a velocidade de fluxo.

A partir desses trabalhos, vários autores têm proposto formulações para a reaeração, porém, pouco se nota variação do conceito inicial; isto é, da formulação básica de Streeter-Phelps:

$$K_2 = a \cdot \frac{\bar{u}^b}{h^c} \quad (\text{II.20})$$

onde:

$\bar{u}$  = velocidade média,

$h$  = profundidade média e,

$a, b, c$  = constantes para cada tipo de curso de água e condição hidráulica.

O coeficiente de reaeração  $K_2$ , é afetado pela temperatura na seguinte relação:

$$K_2^T = K_2^{20^\circ\text{C}} \cdot \theta^{(20 - T)} \quad (\text{II.21})$$

onde:

$K_2^T$  =  $K_2$  à uma temperatura  $T(^{\circ}\text{C})$ ,

$K_2^{20^\circ\text{C}}$  =  $K_2$  à  $20^\circ\text{C}$ , e

$\theta$  = coeficiente de temperatura

Metzger (1968) estudou o efeito da temperatura sobre o coeficiente de reaeração em rios e concluiu que  $\theta$  não é constante; varia continuamente. Normalmente  $\theta$  é tomado igual a 1,047 como sugerido por Streeter e Phelps (1925).

Muitas teorias tem surgido, inclusive contestando a formulação de Streeter e Phelps, como o trabalho de Howe (1977). Rathbun (1977) descreve técnicas de medição de  $K_2$  em rios, apresentando três processos básicos: Técnica utilizando traçadores radioativos (principalmente o Kriptônio - 85), balanço de Oxigênio Dissolvido e técnica de Perturbação do Equilíbrio.

Os modelos propostos, equacionando  $K_2$ , são divididos na literatura na seguinte classificação: a) Conceituais, O'Connor e Dobbins (1958) e Dobbins (1965); b) Semi-Empíricos, relacionando  $K_2$  ao coeficiente de dispersão longitudinal como Krenkel e Orlob (1962) ou incluindo velocidade de fricção como Tackston e Krenkel (1969) e Churchill et alii (1962); c) Empíricos, que relacionam  $K_2$  com velocidade (diretamente) e profundidade (inversamente proporcional), como os de Langbien e Durum (1967) e Owens et alii (1964).

Devido à grande variedade de modelos e de variáveis envolvidos nos mesmos, e ainda, aos diferentes processos de medição no campo, os valores de  $K_2$  variam, de uma forma bastante significativa, de um método para outro. Essa é a principal razão da escolha de  $K_2$  como parâmetro usualmente utilizado na calibração dos modelos de qualidade de água.

#### II.3.2.4. Algas - Fotossíntese e Respiração

As algas são plantas aquáticas simples, que, na sua maioria, contêm clorofila, fator que as permite produzir seu alimento através da fotossíntese; ou seja, usar a energia proveniente da luz solar para converter substâncias inorgânicas em compostos orgânicos em suas células e, através desse processo, liberar oxigênio como sub-produto. Entretanto, durante a noite, quando cessa a insolação, consomem oxigênio, liberando dióxido de carbono, através da respiração. Tanto nas algas como em outras plantas verdes aquáticas, a taxa máxima de fotossíntese é, geralmente, maior que a taxa de respiração, isto é, esses organis-



mos liberam mais oxigênio do que o utilizam, durante o dia, e absorvem mais dióxido de carbono do que liberam.

As algas, durante a noite, agem simplesmente como matéria orgânica morta e exercem uma carga adicional de DBO. Por esta razão, a quantidade de oxigênio e de dióxido de carbono na água, depende em grande parte, das taxas relativas de fotossíntese e respiração.

A produção fotossintética, segundo Bain (1968) está relacionada com a intensidade de luz, profundidade do corpo d'água, idade das células e tipo das algas, temperatura da água, quantidade disponível de nutrientes (tais como Fósforo e Nitrogênio).

O efeito da fotossíntese, das plantas verdes, no balanço de oxigênio num corpo d'água, já foi há muito reconhecido (Streeter e Phelps, 1925) e em estudos de campo conduzidos por Camp (1965), no Rio Merrimack, foi constatado que aproximadamente 2/3 da concentração de oxigênio dissolvido era fornecido pela ação fotossintética das algas presentes.

Várias são as formulações propostas para considerar o efeito da produção fotossintética (P) e do consumo de oxigênio pela respiração (R). Esse efeito pode ser representado pelo modelo sugerido por O'Connor e Di Toro (1970) para P - R:

$$P - R = P_m \cdot \text{sen} \left[ \frac{\pi}{p} (t - t_s) \right] \quad p/ \quad t_s \leq t \leq t_s + p \quad (\text{II.22})$$

$$P - R = 0 \quad p/ \quad t_s + p \leq t \leq t_s + 1 \quad (\text{II.23})$$

ou seja, o efeito das algas é representado por uma curva senóide de meio ciclo, na qual:

$P_m$  = taxa máxima de produção fotossintética de oxigênio  
(mg/l . d),

$t_s$  = tempo no qual a fonte inicia (nascer so sol) (d), e

$p$  = fração do dia na qual a fonte está ativa (d)

Assume-se que essa função irá repetir-se, periodicamente, todos os dias.

Vários métodos, para a determinação quantitativa da fotossíntese, podem ser encontrados na literatura específica, figurando entre eles, os seguintes: (O'Connor e Di Toro, 1970).

1) A técnica que envolve análises em frascos claros e escuros, com medidas diretas.

2) Cálculo da produção de oxigênio com a determinação, em laboratório, da taxa líquida de fotossíntese por unidade de peso bruto de plantas aquáticas ou por unidade de concentração de clorofila e a relação desta taxa com a intensidade da luz solar.

3) A técnica baseada no balanço de oxigênio. Se todos os componentes, que não forem algas, são conhecidos (fontes e consumidores) e forem subtraídos da curva diurna de OD, o que deverá permancer, significará a presença de algas.

Entre os trabalhos elaborados por Camp (1965), O'Connell e Thomas (1965), Bain (1968), O'Connor e Di Toro (1970), Koivo e Phillips (1972), Lin et alii (1973), Nemerow (1974),

Hornberger et alii (1976), Rutheford (1977), Hornberger (1979) e King (1980), pode-se verificar os métodos para a obtenção dos parâmetros influentes no fenômeno e a sua importância como parte ativa no balanço de oxigênio.

Levando em consideração a variação cíclica, dos efeitos causados pelas algas, dentro de um intervalo de 24 horas e ainda, a sua significância menor a partir de certas profundidades, vários autores desprezam o efeito fotossintético quando analisam variações de OD em um intervalo de vários dias e com coletas mais profundas.

#### II.3.2.5. Demanda Bêntica

Um consumo adicional de oxigênio é ocasionado pela decomposição aeróbica e anaeróbica, lenta e gradual, de materiais orgânicos sedimentados no fundo de rios ou canais. Essa decomposição é conhecida como estabilização bêntica, que liberando materiais orgânicos carbonáceos e nitrogenados, consome oxigênio e afeta o balanço geral.

A importância de se avaliar os efeitos de tais depósitos, em qualquer estudo referente à capacidade assimilativa de corpos d'água, foi enfatizada por Streeter (1926), principalmente quando afetam o valor de  $K_2$ . Se existem tais depósitos, o valor do coeficiente de reaeração medido deverá estar errado e menor do que seu valor real.

A inclusão desse fator, porém, não é tão simples; re

quer um perfeito conhecimento da extensão superficial dos depósitos, dos coeficientes envolvidos no fenômeno, entre outros parâmetros que afetam essa demanda.

Entre os vários agentes que podem inibir as reações entre a superfície da camada bêntica e o seu interior, Nemerow (1974) cita:

1. Compactação ou consolidação da camada,
2. Produção de gás,
3. Invertebrados, que abrindo "canais" na camada, afetam sua mistura homogênea,
4. Difusão de certos produtos solúveis, de decomposição anaeróbica, nas camadas superiores, e
5. Turbulência causada por cheias e ventos ou obstrução da corrente.

Também figuram como fatores que influem na taxa de decomposição bêntica a quantidade de material passível de decomposição, espessura da camada do depósito, fatores ambientais, tais como pH e temperatura da água, etc...

Vários são os autores que incluem em seus trabalhos, a influência da demanda bêntica nos estudos de qualidade de água. Oldaker (1958) realizou uma série de medições com amostras de sedimentos, medindo o oxigênio consumido de cada uma. Verificou que as mais altas taxas de demanda eram ocasionadas pelas amostras que continham altas percentagens de sólidos voláteis e, que, essas taxas deveriam ser interpretadas como sendo indicativas da magnitude da poluição ocorrida ponto a ponto ao longo do trecho

considerado no rio. Assim como Streeter (1926), conclui que medidas, tais como as do coeficiente  $K_2$ , feitas num rio excessivamente poluído e contendo um suprimento mensurável de oxigênio, deveriam ser tomadas num determinado espaço de tempo em que o rio estivesse, relativamente, livre de depósitos de fundo.

Podem ser destacados ainda, abordando os depósitos bênticos, os estudos de: Dobbins (1964), O'Connor (1967), Dresnack e Dobbins (1968) e O'Connor e Di Toro (1970).

#### II.3.2.6. Sedimentação e Arraste

A matéria orgânica em suspensão na corrente de um corpo d'água exerce uma certa demanda de oxigênio; quando esse tipo de material se deposita no fundo, por ação da gravidade, a taxa de desoxigenação ( $K_1$ ) apresenta um valor maior que o real, devido ao desaparecimento dessa demanda no fluxo da corrente. Na realidade essa demanda é apenas "atrasada" para um tempo futuro, no qual o material se decomporá na forma de depósitos bênticos (discutidos na seção anterior).

Quando existem fluxos não-permanentes e turbulentos na corrente, tais que promovam distúrbios nos depósitos de fundo, revolvendo-os e arrastando-os, a concentração de oxigênio irá mudar. O arraste desses depósitos ocasionará um ligeiro decréscimo no local e um novo decréscimo brusco, a jusante desse ponto, onde o material arrastado irá sofrer nova sedimentação. O depósito, antes anaeróbico, poderá ser então aeróbico e exercer uma grande demanda de oxigênio.

O coeficiente de sedimentação ( $K_3$ ) é uma constante de proporcionalidade que reflete a composição do despejo e do corpo receptor e, ainda, a "quietude" da corrente no ponto considerado.

Em regiões de considerável turbulência,  $K_3$  poderá, por vezes, ser negativo, indicando a ação de arraste no canal, o que reverte o efeito da sedimentação.

Thomas (1948) verificou que  $K_3$  pode ser positivo por um longo período de tempo e tornar-se rapidamente negativo durante uma cheia. O coeficiente pode levar, também, em consideração, o efeito de fontes poluidoras descontínuas, diluição e outros fatores de distúrbio no trecho. As condições hidráulicas do corpo d'água são as principais responsáveis pela sedimentação e arraste do material de fundo.

A sedimentação da matéria orgânica que tem por efeito diminuir a DBO, foi equacionada por Dobbins (1964) sob a forma:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -K_3 \cdot L \quad (\text{II.24})$$

onde:

$L$  = concentração do material suspenso (mg/l), e

$K_3$  = coeficiente de sedimentação (base e) ( $\text{dia}^{-1}$ )

Essa equação apresenta o inconveniente de não considerar a velocidade, pois, é sabido, através de experiências, que velocidades maiores que 0,5 m/s mantêm pequenas partículas de areia em suspensão e que velocidades menores que 0,2 m/s, ocasionam a sedimentação de sólidos orgânicos em suspensão.

A obtenção do coeficiente  $K_d$  é bastante difícil e as equações desenvolvidas para esse fim, referem-se a condições muito específicas. Em face dessas dificuldades, utiliza-se, normalmente, uma análise da velocidade da água no trecho considerado. Se a velocidade for menor que 0,2 m/s, podem existir depósitos potenciais de sedimentação de matéria orgânica.

Entre os pesquisadores que discutem a obtenção dos parâmetros envolvidos e a sua influência na qualidade da água, podem ser destacados, além dos já citados, Camp (1965), Bella e Dobbins (1968), Rich (1973) e Rinaldi et alii (1979).

#### II.3.2.7. Fósforo

A importância do Fósforo, relativa à qualidade da água, está no fato de que ele figura entre os principais nutrientes para as algas. Concentrações baixas de Fósforo têm como efeito, reduzir a taxa de crescimento das algas, diminuindo, assim, o conteúdo de OD proveniente da fotossíntese. A um nível adequado desse substrato, a taxa de crescimento atinge um valor máximo a uma dada temperatura e condições existentes de luz, essencialmente, seguindo uma reação cinética de 1ª ordem. Entretanto, a baixas concentrações, essa taxa torna-se proporcional à concentração do nutriente.

O Water Quality Criteria (1968) estudou os critérios para as concentrações de Fósforo, mas esclarece a impossibilidade de estabelecer-se um limite geral aceitável, tendo-se em vista a complexidade do problema.

Branco e Rocha (1977) citam que o propósito de estabelecer tais limites seria para evitar problemas associados à proliferação excessiva das algas e outras plantas aquáticas.

A bibliografia clássica indica como sendo de 0,01 a 0,02 mg/l as concentrações de Fósforo potencialmente nocivas e de 0,005 mg/l, a concentração considerada como limitadora do crescimento de algas.

As concentrações críticas de Fósforo podem variar em função de outras características de qualidade de água, como por exemplo, a turbidez e a concentração de Nitrogênio.

#### II.3.2.8. Temperatura

A temperatura das águas superficiais varia com a localização geográfica e as condições climáticas do local.

Figura como importante fator ecológico, pois quando na presença de altas temperaturas, a solubilidade do gás é consideravelmente reduzida. Logo, quando a temperatura do corpo d'água aumenta, o OD diminui. Em adição, a atividade de micro-organismos aumenta, acarretando assim um acréscimo significativo de consumo de oxigênio ou da DBO. Os efeitos combinados de descargas térmicas, propiciarão dessa forma, a deteriorização da qualidade da água, com efeitos deletérios à biota e alteração das características químicas do corpo d'água.

Assim, as variações da temperatura, que em regiões tropicais são pequenas, estão ligadas a mudanças nos teores de



oxigênio, carbonatos, pH, e ainda nas taxas de reaeração, desoxigenação, fotossíntese, coliformes, etc...

#### II.4. A Influência dos Colifórmes Fecais na Qualidade da Água

As bactérias têm sido utilizadas, como indicadores de qualidade sanitária da água, desde 1880, quando o *Bacillus coli* e organismos similares, foram identificados como componentes normais dos esgotos contendo fezes humanas (Branco e Rocha, 1977).

Os coliformes fecais, medidos em termos de número mais provável de coliformes contidos em 100 ml de água, podem ser considerados indicadores de poluição fecal recente e é necesário considerá-los também como indicadores potenciais de contaminação (organismos aquáticos patogênicos).

As concentrações de coliformes, geralmente, crescem durante tempestades e este aumento é função de vários fatores, tais como: área de drenagem, duração, intensidade e localização da chuva, uso do solo na região, etc...

A significância sanitária dos coliformes fecais depende da fonte poluidora, do nível de tratamento obtido e dos efeitos ambientais no corpo receptor (Strobel, 1968).

No passado, o teste de coliformes fecais, foi o principal meio de classificação das fontes de água bruta para abastecimento público. Com o avanço dos métodos para tratamento de esgotos, e ainda com o advento da cloração, este critério foi modi

ficado devido à possibilidade de redução da concentração deste constituinte.

Pelo Water Quality Criteria (1968) concentrações de 10.000 coli/100 ml de coliformes totais e 2000/100 ml de coliformes fecais são toleráveis em águas brutas. A Portaria/GM/Nº 0013, de 15 de janeiro de 1976, a SEMA, Secretaria Especial do Meio Ambiente, estabelece:

- Para as águas classe 2: não deverá ser excedido um limite de 1000 coliformes fecais por 100 ml, em 80% ou mais, de pelo menos 5 amostras mensais colhidas em qualquer mês;

- Para as águas classe 3: o número limite é de 4.000 coliformes fecais por 100 ml, seguindo o mesmo critério adotado para a classe 2.

Os coliformes fecais são de natureza não-conservativa e sua taxa de decaimento, em sistemas aquáticos, é dependente da temperatura.

É aceita a hipótese de que o decaimento dos coliformes obedece a uma reação cinética de 1ª ordem, processando-se segundo função exponencial (Thornton, et alii 1980):

$$C = C_0 \cdot e^{-Kt} \quad (\text{II.25})$$

onde:

C = concentração dos coliformes num tempo t a uma dada temperatura,

C<sub>0</sub> = concentração inicial de coliformes numa dada temperatura,

$K$  = taxa de decaimento, e

$t$  = tempo

## II.5. Os Materiais Radioativos e a Qualidade da Água

Uma importante consideração no tocante à qualidade da água, é a contaminação da mesma por materiais radioativos. Faz-se necessário o conhecimento dos efeitos decorrentes da liberação, programada ou acidental, desses materiais, por centrais nucleares localizadas próximas a rios, estuários e bacias costeiras.

Recentemente, com o crescente desenvolvimento das usinas nucleares, os impactos causados por despejos térmicos e químicos, vêm merecendo especial atenção. Além disso, esses despejos podem trazer consigo materiais radioativos formados pela fissão do combustível nuclear, por impurezas no reator de água para resfriamento, entre outros fatores. Uma fração desses materiais entra na planta de despejo do sistema e é canalizada, como efluente, para correntes próximas.

Os organismos aquáticos são, dessa maneira expostos aos radionuclídeos, liberados no ambiente durante os vários passos do ciclo nuclear e, a água, tem a sua qualidade afetada.

Aceita-se, geralmente, a hipótese de que os organismos aquáticos não recebem danos causados por doses externas de radiação no seu ambiente. Entretanto, devido à possível bioacumulação de radionuclídeos, existe a possibilidade desses organis-

mos serem afetados, adversamente, por doses internas. Dessa forma, a biota aquática existente nas áreas próximas a uma usina nuclear, quando exposta a baixos níveis de radioatividade, pode receber uma dose proveniente de emissores internos, como resultado dos radionuclídeos assimilados no alimento e absorvidos pela água. Pode acontecer ainda exposição externa decorrente da imersão na água que contém a radioatividade e ainda, devido aos radionuclídeos acumulados nos sedimentos.

Uma vez que os organismos aquáticos podem concentrar radionuclídeos em seus tecidos a níveis mais altos que a concentração no ambiente aquático, a dose devida aos emissores internos poderá contribuir, mais efetivamente, na dose total recebida por esses organismos.

A solução para o problema desse tipo de poluição consiste em limitar e controlar essas liberações, tais que os efeitos adversos ao homem e ao seu ambiente, possa ser reduzido a níveis aceitáveis.

Os despejos rotineiros, provenientes dos processos do ciclo nuclear, são restritos ao consentimento da International Commission on Radiological Protection (ICRP), que recomenda limites para as doses de radiação.

Duas precauções principais devem ser então tomadas: estimar a dose recebida pela biota aquática proveniente dos diferentes processos e determinar o impacto das doses estimadas sobre a biota.

Além de afetar, de forma significativa, a biota aquática, os materiais radioativos podem interferir na qualidade da água destinada ao abastecimento da população em geral; logo, a obtenção de dados, que forneçam sua concentração, é de grande importância no controle e manutenção de níveis aceitáveis.

Existem, disponíveis, várias formulações para o modelamento de materiais radioativos, específicos para cada caso que se deseja analisar.

Roesner et alii (1977), sugerem modelá-los, simplesmente, como materiais não-conservativos; ou seja:

$$\frac{dR}{dt} = - K \cdot R \quad (\text{II.26})$$

onde:

R = concentração do material radioativo, e

K = taxa de decaimento do material

## CAPÍTULO III

## III. MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA

Uma importante consideração nos problemas de poluição de rios e canais é o desenvolvimento de modelos auxiliares na análise e controle da qualidade da água.

Apesar da tridimensionalidade dos sistemas reais, podem-se obter bons resultados com simulações em uma ou duas dimensões. Larga variedade de modelos unidimensionais tem sido elaborada e sua aplicação visa esses fins. Geralmente descrevem concentrações de Oxigênio Dissolvido e Demanda Bioquímica de Oxigênio e consistem em equações de continuidade, desenvolvidas através da aplicação do princípio de conservação de massa.

As diferenças gerais no nível e refinamento na resolução, entre os modelos, são associadas a três principais fatores:

- grau de detalhamento espacial e temporal,
- número de parâmetros envolvidos, e
- técnica de solução matemática utilizada

Para qualquer aplicação específica, existe uma combinação ótima dos três itens dependendo do propósito do trabalho.

Um resumo de alguns desses modelos é apresentado nas tabelas III.1 e III.1.A. (Shasttry et alii, 1973).

AUTORES	EQUAÇÃO DE DBO	EQUAÇÃO DE OD
Streeter-Phelps (1925)	$\frac{\partial L}{\partial t} = -K_1 \cdot L$	$\frac{\partial C}{\partial t} = -K_1 \cdot L + K_2 (C_S - C)$
Camp (1965)	$\frac{\partial L}{\partial t} = -K_1 \cdot L - K_3 \cdot L + L_a$	$\frac{\partial C}{\partial t} = -K_1 \cdot L + K_2 (C_S - C) + P$
Thomann (1963)	$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (Q \cdot L) +$ $+ \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (D_L \cdot A \cdot \frac{\partial L}{\partial x}) + \Sigma S_L$	$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (Q \cdot C) +$ $+ \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (D_L \cdot A \cdot \frac{\partial C}{\partial x}) + \Sigma S_C$
Dobbins (1964)	$D_L \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - u \cdot \frac{\partial L}{\partial x} - K_1 \cdot L - K_3 \cdot$ $\cdot L + L_a = 0$	$D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - K_1 \cdot L +$ $+ K_2 (C_S - C) - D_B = 0$
Thomann (1967)	—	$\frac{\partial C}{\partial t} = K_2 \cdot C_S(t) - K_2 \cdot C(t)$
Bella-Dobbins (1968)	$\frac{\partial (A \cdot L)}{\partial t} = \frac{\partial (A \cdot D_L \cdot \frac{\partial L}{\partial x})}{\partial x} -$ $- \frac{\partial (u \cdot A \cdot L)}{\partial x} -$ $- (K_1 + K_3) A \cdot L + A \cdot L_a$	$\frac{\partial (A \cdot C)}{\partial t} = \frac{\partial (A \cdot D_L \cdot \frac{\partial C}{\partial x})}{\partial x} -$ $- \frac{\partial (u \cdot A \cdot C)}{\partial x} - K_1 \cdot A \cdot L +$ $+ K_2 \cdot A \cdot (C_S - C) - A \cdot D_B$
Dresnack Dobbins (1968)	$\frac{\partial L}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - u \cdot \frac{\partial L}{\partial x} -$ $- (K_1 + K_3) L + L_a$	$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} -$ $- K_1 \cdot L - K_2 (C_S - C) - D_B$
Di Toro (1969)	—	$\frac{\partial C}{\partial t} + u(x, t) \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \Sigma C$

TABELA III.1 - Modelos Desenvolvidos para o Cálculo de OD e DBO. (Shastry, Fan e Erickson, 1973)

$L$  = concentração de DBO

$C$  = concentração de OD

$L_a$  = taxa de adição de DBO

$C_S$  = concentração de saturação de OD

$t$  = tempo

$x$  = distância

$P$  = taxa de fotossíntese

$K_1$  = coeficiente de desoxigenação

$K_2$  = coeficiente de reaeração

$K_3$  = coeficiente de sedimentação

$u$  = velocidade longitudinal

$Q$  = vazão

$D_L$  = coeficiente de dispersão longitudinal

$A$  = área da seção transversal

$S_L$  = taxas de adição ou subtração de DBO

$S_C$  = taxas de adição ou subtração de OD

$D_B$  = taxa de remoção de oxigênio pela demanda bêntica

TABELA III.1.A - Variáveis e Parâmetros dos Modelos da  
Tabela III.1



Muitos outros autores analisam a relação OD-DBO, sugerindo modelos que sendo, na sua quase totalidade, modificações das equações de Streeter-Phelps (1925), diferenciam-se, apenas, pelas características já mencionadas.

Modelos unidimensionais são utilizados quando existe a possibilidade dos parâmetros enfocados serem considerados constantes na seção transversal e os modelos permanentes, para avaliar condições de estado estável, no qual, os valores das variáveis de entrada não variam com o tempo.

### III.1. Modelos Pesquisados

#### III.1.1. Modelo de Streeter-Phelps

Antes do trabalho pioneiro de Streeter-Phelps, em 1925, a capacidade assimilativa dos rios receptores de despejos era determinada baseada unicamente na diluição. Reconhecendo os erros advindos dessa consideração, desenvolveram então a formulação do balanço de oxigênio, analisando apenas os processos de desoxigenação da matéria orgânica e reaeração.

Eles demonstraram, em seu trabalho sobre a poluição no Rio Ohio, que mudanças no conteúdo de oxigênio dissolvido de um rio estavam intimamente associadas às mudanças bioquímicas e eram causadas, primariamente, pela oxidação da matéria orgânica descarregada no rio. Na presença dessa matéria oxidável, de um suprimento de oxigênio e de certas bactérias, a reação bioquímica ocorria seguindo uma reação bio-cinética de primeira ordem. A

partir das primárias leis da oxidação e da reoxigenação, a equação geral resultante poderia ser obtida e expressa em termos de oxigênio dissolvido.

De acordo com seus estudos, estabeleceram que as mudanças no déficit de oxigênio eram governadas por duas reações independentes:

- 1 - O déficit cresce numa taxa assumida proporcional à demanda da matéria orgânica, e
- 2 - O déficit decresce, devido à reaeração, numa taxa diretamente proporcional ao seu próprio valor.

As duas taxas podem ser expressas, na sua forma diferencial, como:

$$- \frac{dL}{dt} = \frac{dD_1}{dt} = K_1 \cdot L \quad (\text{III.1})$$

$$\frac{dD_2}{dt} = - K_2 \cdot D \quad (\text{III.2})$$

onde:

t = tempo de reação (dias),

L = demanda de oxigênio - DBO (ppm),

D = déficit de oxigênio (ppm),

$dD_1/dt$  = taxa de desoxigenação,

$dD_2/dt$  = taxa de reaeração,

$K_1$  = coeficiente de desoxigenação ( $\text{dia}^{-1}$ ), e

$K_2$  = coeficiente de reaeração ( $\text{dia}^{-1}$ )

A equação geral resultante pode ser expressa em termos de déficit de oxigênio ( $D$ ) e  $\bar{e}$ , simplesmente, a soma algébrica das duas taxas parciais opostas. Teremos então:

$$\frac{dD}{dt} = K_1 \cdot L - K_2 \cdot D \quad (\text{III.3})$$

que é uma equação diferencial linear de primeira ordem, tendo como solução analítica:

$$D = \frac{K_1 \cdot L_a}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + D_a \cdot e^{-K_2 t} \quad (\text{III.4})$$

onde:

$D_a$  = déficit de oxigênio inicial (ppm), e

$L_a$  = demanda bioquímica inicial de oxigênio (ppm)

O modelo considera escoamento uniforme e permanente e não leva em conta fenômenos importantes, como, por exemplo, a difusão.

Tendo-se em mente suas limitações, a aplicação de dados experimentais a essa equação, permitirá a obtenção de algumas constantes que caracterizam determinado rio e uma idéia da capacidade assimilativa de um certo trecho do mesmo.

### III.1.2. QUAL-I

O QUAL-I (White, 1971) é um modelo unidimensional em regime hidráulico permanente.

Simula as variações espaciais e temporais dos seguintes parâmetros: Oxigênio Dissolvido, Demanda Bioquímica (Carboná

cea e Nitrogenada) de Oxigênio, Temperatura, Coliformes e um Material Conservativo; considerando os processos de depuração e transporte de cada um deles.

As equações governantes, são diferenciais parciais de segunda ordem do tipo parabólica e são solucionadas, numericamente, por diferenças finitas, através de um esquema implícito regressivo.

Considerando, especificamente, a Demanda Bioquímica de Oxigênio e o Oxigênio Dissolvido, o modelo é capacitado para analisar a biodegradação da matéria orgânica carbonácea e nitrogenada e demanda bêntica. Possui a opção de aumento de fluxo se não for atingido um nível mínimo permissível de Oxigênio Dissolvido.

### III.1.3 SIMOX

Desenvolvido por Bartone e Castagnino, (1973) no CEPIS (Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria Y Ciencias del Ambiente), o SIMOX, analisa os recursos de Oxigênio Dissolvido provendo uma combinação ótima de incrementos de fluxos mínimos e de tratamento dos despejos, visando satisfazer requisitos mínimos permissíveis de oxigênio.

Resumindo, o SIMOX é um modelo bem simples, simulando apenas Demanda Bioquímica Carbonácea e Oxigênio Dissolvido e se baseia nas equações de Streeter-Phelps modificados por Tsivoglou, para incluir cargas bênticas e de ribeirões. A solução é

obtida, analiticamente, a partir das referidas equações.

#### III.1.4. QUAL-II/SEMCOG

O modelo QUAL-II/SEMCOG (Roesner et alii, 1977) é, na verdade, uma versão melhorada do QUAL-II desenvolvido em 1973 pelo Water Resources Engineers, Inc. para o EPA Systems Development Branch que, por sua vez, possui a mesma estrutura do QUAL-I, porém, com muito mais recursos para analisar o problema da qualidade da água.

O QUAL-II, versão SEMCOG, também foi elaborado pelo WRE, Inc., para o Southeast Michigan Council of Governments (SEMCOG) e, como o QUAL-II tem a capacidade de simular 12 constituintes.

Sendo este o modelo utilizado no presente trabalho, será tratado mais detidamente no capítulo V.

Maiores detalhes sobre os modelos aqui mencionados, serão encontrados nas Tabelas III.2, III.3, III.4 e III.5, que listam uma série de características de cada um, possibilitando uma comparação entre os mesmos (Grimsrud et alii, 1976).

#### III.1.5. Outros Modelos

Outros dois modelos foram também estudados: o DOSAG-I (1970) e o "Hydraulic and Water Quality Model for a River Network" (Tucci, 1978).

O primeiro é bem simples ; trabalha em estado estacionário e utiliza as equações clássicas de Streeter-Phelps para simular Oxigênio Dissolvido e Demanda Bioquímica de Oxigênio (Carbonácea e Nitrogenada).

O segundo simula tanto variações hidráulicas quanto de qualidade de água de um canal aberto, sendo também unidimensional, porém, em regime não permanente. É governado pelas duas equações de Saint Venant e as equações de transporte são resolvidas pelo método das diferenças finitas. A equação de transporte utiliza os termos de advecção, dispersão e reações do constituinte. A variação da vazão e dos níveis é representada por duas equações diferenciais: da continuidade e do movimento.

MODELOS	CORPO D'ÁGUA		VARIABILIDADE TEMPORAL	LIMITAÇÕES NA DISCRETIZAÇÃO	CARACTERÍSTICAS ESPECIAIS
	TIPO	CARACTERÍSTICAS			
DOSAG-I (1970)	Rios	Somente Variações Longitudinais	Permanente	$\leq 10$ Fontes/Cabeceira $\leq 20$ Trechos $\leq 20$ Junções $\leq 50$ Sub-Trechos	Opção de Aumento de Fluxo, Fontes Distribuídas ou Pontuais
SIMOX (1973)	"	"	"	$\leq 99$ Trechos (Incluindo do Trechos do Sistema Principal, Tributários Primários e Secundários)	"
QUAL-I (1971)	"	"	"	$\leq 25$ Trechos $\leq 25$ Pontos de E/S $\leq 5$ Fontes/Cabeceira $\leq 5$ Junções	Opção de Aumento de Fluxo, Somente Fontes Pontuais
QUAL-II (1973)	"	"	"	$\leq 75$ Trechos $\leq 90$ Pontos de E/S $\leq 15$ Fontes/Cabeceira $\leq 15$ Junções	"

TABELA III.2 - Características dos Modelos Analisados

MODELOS	CONSTITUINTES SIMULADOS	PROCESSOS INTERNOS SIMULADOS	
		FÍSICOS	DECAIMENTO E/OU CRESCIMENTO
DOSAG-I	OD DBO (Carbonácea e Nitrogenada)	Diluição e Advecção	Dcaimento de 1 <sup>a</sup> Ordem OD-DBO, Reaeração, Efeitos da Temperatura
SIMOX	OD DBO Carbonácea	Diluição	"
QUAL-I	OD DBO Carbonácea Temperatura Tres Mat. Conservativos	Diluição e Advecção	"
QUAL-II	DBO Carbonácea, OD, Temperatura, NH <sub>3</sub> , NO <sub>2</sub> , NO <sub>3</sub> , Algas, Fósforo, Demanda Bêntica, Coliformes, Mat. Radioativos, Tres Mat. Conservativos	"	Interações Algas-Nutrientes, OD-DBO, Dcaimento de 1 <sup>a</sup> or dem, Reaeração, Efeitos da Temperatura

TABELA III.3 - Constituintes Simulados pelos Modelos



MODELOS	HIDROLOGIA	HIDRODINÂMICA	FATORES DE QUALIDADE DE ÁGUA	EFLUENTES	TAXAS DE DECAIMENTO	OUTROS
DOSAG-I	Vazões das Fontes de Cabeceira dos Despejos, das Retiradas, e da Água Subterrânea (ctes)	Comprimento dos Trechos	Concentração (cte) dos Contribuintes nas Fontes de Cabec. e Tributários e Temperatura	Vazões e Concentrações dos Contribuintes	Coef. de Reaeração e 2 de Desoxigenação, Fator de Correção p/Temperatura	Fatores de Tratamento
SIMOX	"	"	"	"	Coef. de Desoxigenação	—
QUAL-I	"	Comprimentos e Larguras, Coeficiente de Manning, em Toda a Extensão do Rio	"	Vazão cte e Concentrações	Taxa de Decaimento de DBO	Coefic. de Evaporação, Dia do Ano, Clima, Lat/Long da Bacia
QUAL-II	"	"	"	"	Várias Taxas de Decaimento de Parâmetros e Coef. de Sedimentação	"

TABELA III.4 - Dados de Entrada Requeridos nos Modelos

MODELOS	EQUAÇÕES PARA OXIGÊNIO DISSOLVIDO
DOSAG-I *	$D = \frac{K_1 \cdot L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_2 t} - e^{-K_1 t}) + \frac{K_3 \cdot N_0}{K_2 - K_3} (e^{-K_2 t} - e^{-K_1 t}) + (C_S - C_0) e^{-K_2 t}$
SIMOX **	$D = \frac{K_1 \cdot L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + \frac{24 R_C \cdot V}{K_2 (K_2 - K_1)} \left[ K_2 (1 - e^{-K_1 t}) - K_1 (1 - e^{-K_2 t}) \right] + \frac{24 \cdot L_b \cdot V}{K_2} (1 - e^{-K_2 t}) + D_0 e^{-K_2 t}$
QUAL-I	$A \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial (A \cdot D_L \cdot \partial C / \partial x)}{\partial x} - \frac{\partial (A \cdot \bar{u} \cdot C)}{\partial x} + A \left[ K_2 (C_S - C) - K_1 \cdot L \right]$
QUAL-II	$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{(Ax \cdot D_L \cdot \partial C / \partial x)}{Ax \cdot \partial x} - \frac{(Ax \cdot \bar{u} \cdot C)}{Ax \cdot \partial x} + \frac{S_C}{Ax \cdot dx} + \left[ K_2 (C_S - C) + (\alpha_3 \mu - \alpha_4 \rho) A - K_1 \cdot L - \frac{K_4}{Ax} - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2 \right]$

TABELA III.5 - Equações Propostas nos Modelos

\* Concentrações de oxigênio (solução)

\*\* Déficit de oxigênio dissolvido (solução)

## CAPÍTULO IV

## IV. CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DE UM MODELO

Vários são os trabalhos que propõem metodologias sistemáticas para o estudo e a análise dos vários aspectos de um sistema e do seu comportamento, fazendo uso de modelos matemáticos e/ou físicos. Esses trabalhos sugerem também processos de tomada de decisão, selecionando a melhor política alternativa, sujeita às restrições pertinentes, utilizando técnicas de simulação e otimização.

Um modelo matemático é representado por um conjunto de equações que descrevem e representam um sistema real. Essas equações cobrem as várias características do sistema, identificam as relações funcionais entre os seus componentes, estabelecem medidas de efetividade e restrições e indicam os dados que deverão ser coletados para que se possa lidar com o problema de forma quantitativa.

Essas equações podem ser algébricas, diferenciais, etc... dependendo da natureza do sistema a ser modelado.

O modelamento matemático de fenômenos físicos, particularmente quando dirigido para o problema da qualidade dos corpos d'água, dá origem a sistemas de equações diferenciais, de solução não muito simples e com condições de contorno nem sempre conhecidas.

Para resolver tais problemas, dispõem-se de métodos numéricos encontrados na literatura, que podem ser aplicados facilmente. No entanto, esses métodos esbarram no problema da determinação das condições de contorno do fenômeno e na determinação dos parâmetros dessas equações.

Usualmente, através de tentativas, tenta-se obter uma aproximação dos parâmetros a serem estimados; método comum, porém pouco eficaz.

Uma técnica para solucionar o problema de identificação de parâmetros e condições de contorno de equações diferenciais não-lineares, a Quasilinearização, e a importância da validação de um modelo são apresentados a seguir.

#### IV.1. Introdução

O processo de construção de um modelo matemático, sua associação a um sistema real, segundo Rinaldi et alii (1979), obedece a fases distintas, as quais classificam-se em: conceitualização, estimativa de parâmetros, validação e aplicação.

A conceitualização, primeiro passo, envolve a seleção das variáveis relevantes, a formação de idéias das interações entre essas variáveis e, ainda, estabelece a estrutura geral do modelo. Um aspecto importante nesse estágio é a exploração das propriedades gerais do modelo, tais como estabilidade e sensibilidade, por constituir, tal análise, a única base racional para a validação da estrutura do modelo a esta altura do pro

cesso.

Após a elaboração da estrutura faz-se necessário designar valores a algumas constantes denominadas parâmetros, inserindo, dessa forma, o modelo numa determinada classe particular. O processo pelo qual se obtém parâmetros que melhor reproduzam os dados observados em campo, é denominado estimativa de parâmetros. A conceitualização e a estimativa de parâmetros, são denominados usualmente, em conjunto, como identificação do sistema.

No segundo passo, utiliza-se o modelo para simular o sistema com dados atuais e reais; verifica-se então se os resultados obtidos correspondem à situação atual do sistema real. Se isto não ocorre, faz-se necessária uma análise mais profunda dos parâmetros envolvidos, a fim de verificar os que requerem maior refinamento e então, efetuar os estudos necessários para precisá-los. Uma vez que o modelo tenha reproduzido as condições reais, com um grau aceitável de tolerância, considera-se o modelo calibrado.

Concluída a identificação, deverá ser testada a validade do modelo, isto é, faz-se necessário conferir se o mesmo reproduz observações que não foram utilizadas nos passos anteriores. Se o resultado desse passo não for satisfatório, recorre-se novamente à conceitualização, onde o modelo deverá ser reestruturado.

A identificação dos parâmetros do sistema é fator essencial no sentido de se obter uma política ótima de controle.

Haimes (1977) define o termo estimativa de parâmetros da seguinte maneira: dado um conjunto de "entradas" e correspondentes "saídas" de um sistema, o problema consiste em determinar um conjunto de parâmetros que minimize a norma dos erros entre as saídas do modelo matemático e do sistema físico.

A escolha apropriada para um critério de erro, para um dado problema de identificação de parâmetros, é muito importante. Essa escolha depende das relações funcionais do modelo matemático, do objetivo do processo de identificação, da natureza dos parâmetros envolvidos e dos dados disponíveis.

## IV.2. Métodos de Calibração

### IV.2.1. Tentativa e Erro

Em geral, parâmetros tais como o coeficiente de reação ( $K_2$ ), o coeficiente de desoxigenação ( $K_1$ ) e outros, têm sido determinados, devido a sua difícil obtenção, através de testes de laboratório utilizando-se amostras de água, através de técnicas gráficas, etc..., que envolvem uma grande margem de erro.

Dependendo do conhecimento do fenômeno e da existência de medições adequadas, esses parâmetros podem ser estimados com um certo grau de aproximação, mas, quando inseridos nos modelos, podem conduzir a resultados insatisfatórios. O que normalmente se faz é tentar melhorar esses valores heurísticamente; ou seja, procura-se através de tentativas, valores que forneçam resultados mais próximos dos valores reais.

Em modelos de qualidade de água, que simulam o oxigênio dissolvido ao longo de um rio, são feitas variações nos valores dos parâmetros, procurando-se obter, dessa forma, o melhor ajuste entre a curva observada e a calculada pelo modelo.

Tal procedimento tem muitas desvantagens; além de cansativo é caro, podendo demandar um tempo muito longo e, não raras vezes, resultar num trabalho infrutífero.

#### IV.2.2. Métodos Automáticos

Pode-se dizer que há uma forte relação entre a identificação do sistema, como um aspecto do modelamento, e a otimização do mesmo (Haimes e Wismer, 1971), entretanto esses dois importantes problemas são tratados, na literatura, ainda nos dias de hoje, como problemas separados.

Devido ao crescente interesse e ao grande investimento no controle e gerenciamento da qualidade de água e, ainda, às diferentes respostas obtidas através de modelos para esses fins e do próprio sistema físico, faz-se necessário utilizar técnicas mais seguras, que otimizem esses modelos, minimizando os erros advindos e que implementem o controle e reduzam os custos envolvidos.

Vários trabalhos têm sido desenvolvidos e demonstram o potencial das técnicas de otimização aplicadas a problemas de qualidade de água.

Entre os trabalhos mais atuais, abrangendo a identificação de parâmetros envolvidos em modelos de qualidade de água, podem ser destacados os seguintes:

Koivo e Phillips (1971) - estimaram  $K_1$  e  $K_2$ , a partir de dados com distúrbios, utilizando uma versão modificada do modelo de Streeter-Phelps. Os valores determinados eram considerados ótimos, uma vez que o critério para o erro era minimizado de forma assintótica. Esse critério foi estabelecido como sendo a diferença quadrada entre os valores de OD calculados e observados, avaliados em pontos discretos. Os valores obtidos para os parâmetros eram ajustados com auxílio de um método estocástico de aproximação, tal que a função erro era sequencialmente minimizada quando eram recebidos novos dados. O modelo utilizado no trabalho é linear com coeficientes constantes, porém, o algoritmo é também aplicável para o caso de coeficientes variantes no tempo e para modelos não-lineares. O método tem a vantagem de não necessitar a solução explícita das equações que descrevem o modelo.

Koivo e Phillips (1972) - utilizaram uma modificação do modelo de Streeter-Phelps, para considerar fotossíntese, e demonstraram que, utilizando apenas poucas medidas de OD ao longo de uma seção de rio, poderia se determinar a média diária de DBO, o coeficiente de remoção de DBO ( $K_1$ ) e a média diária de fotossíntese (P) menos respiração (R). O problema foi estudado em duas partes:

1 - Identificação de  $K_1$  e (P-R), que pode ser acoplada com valores desconhecidos de DBO, e



## 2 - Determinação das concentrações de DBO.

Para atingir os objetivos acima, o modelo, antes contínuo, foi discretizado convenientemente.

A vantagem do trabalho apresentado consiste no fato de que são necessárias apenas medidas de OD, uma vez que as de DBO são de difícil obtenção.

Shastri et alii (1973) - além de discutir vários métodos sugeridos para estimar parâmetros não-lineares, apresentaram três diferentes modelos modificados de Streeter-Phelps e utilizaram o algoritmo de Bard para calcular os parâmetros dos mesmos e duas funções objetivo diferentes: mínimos quadrados, com determinado fator de peso e máxima verossimilhança, com matriz de covariância desconhecida. O algoritmo de Bard, método iterativo, encontra-se disponível como rotina IBM.

Boyle et alii (1974) - em decorrência das inúmeras falhas envolvidas na estimativa de  $K_2$ , utilizaram o modelo de Streeter-Phelps e a função de mínimos quadrados, para analisar os erros no cálculo desse parâmetro.

Koivo e Koivo (1978) - também utilizando Streeter-Phelps, propuseram um estimador para os parâmetros do modelo. Foram usados dados de OD com distúrbios, contínuos no tempo, mas discretos no espaço.

Rinaldi et alii (1979) - propuseram um esquema para estimar  $K_1$  e  $K_2$ , a partir do modelo de Dobbins, baseado no critério de mínimos quadrados. A vantagem do método consiste na sua

flexibilidade uma vez que não requer uniformidade na geometria de medição dos pontos e pode ser utilizado tendo disponíveis apenas três pontos medidos na parte crítica da curva de OD.

Constable e Mc Bean (1979) - utilizaram o Filtro Kalman e desenvolveram uma técnica para estimar DBO carbonácea e nitrogenada, partindo do modelo de O'Connor, do vetor de medidas disponíveis e da matriz de covariância dos distúrbios medidos. Valeram-se da técnica de Rosenbrock para a estimativa dos parâmetros.

O que se pode observar, revisando a literatura específica, é que os métodos numéricos mencionados apresentam falhas quanto à determinação das condições de contorno e, na maioria das vezes, são restritos a determinadas aplicações.

Os métodos apresentados por Koivo e Phillips (1971 e 1972), por exemplo, são pouco utilizáveis em situações práticas, uma vez que requerem pontos de medições distribuídos uniformemente ao longo do rio; condição geralmente não satisfeita. Há também o fato dos seus esquemas terem sido testados somente para os chamados "dados sintéticos"; isto é, dados gerados pela adição de erros randômicos às soluções exatas do modelo. Nesse aspecto, o trabalho de Shastry et alii (1973) apresenta-se como exceção pois utiliza dados reais. Uma outra desvantagem do método sugerido por Koivo e Phillips (1972) reside no fato de ser restrito a modelos lineares.

A técnica de Quasilinearização, método iterativo proposto por Bellman e Kalaba (1965) a ser utilizado neste trabalho,

apresenta a vantagem de ser aplicável a um grande número de equações diferenciais com condições de contorno e, ainda, fornecer uma rápida convergência, reduzindo o número de iterações necessárias. Esse método será apresentado, detalhadamente, a seguir.

#### IV.2.2.1. Quasilinearização

##### IV.2.2.1.1. Introdução

Geralmente, em engenharia e em ciências físicas, ocorrem vários problemas de valor de contorno bi-pontuais e multipontuais. Esses problemas são, frequentemente, não-lineares e, ainda, acompanhados de várias dificuldades analíticas e numéricas.

Analiticamente, não existe uma prova geral da existência e unicidade das soluções. Numericamente, existem técnicas que às vezes não são muito convenientes para obter soluções numéricas para determinados problemas (Lee, 1968). Essas dificuldades numéricas são ocasionadas pelo fato de que nem todas as condições necessárias são dadas em todos os pontos. Para obter essas condições inexistentes um procedimento de tentativa e erro é geralmente utilizado, o que implica que o processo tenha, por vezes, uma taxa de convergência relativamente lenta.

Ademais, para um grande número de problemas, as condições iniciais hipotizadas, para se obter a convergência desejada, devem estar bem próximas das corretas mas, ainda, desconhecidas.

Em se tratando de sistemas de recursos hídricos, seus componentes físicos são representados, satisfatoriamente, por modelos não muito simples. Considerando, mais precisamente, os modelos de qualidade de água, esses envolvem complexas equações diferenciais não-lineares. Além disso, os parâmetros envolvidos, tais como coeficientes de reações e de difusão, não podem ser medidos diretamente; devem ser calculados a partir das variações da concentração de OD em relação ao tempo e espaço. Logo, estes parâmetros devem ser estimados diretamente, a partir do conjunto de equações diferenciais e dos dados experimentais.

O método numérico de Quasilinearização é particularmente eficaz para solucionar sistemas de equações diferenciais não-lineares, ordinárias e parciais, com parâmetros desconhecidos e com condições iniciais e de contorno. Supõe-se, nesse método, que existam adequadas observações das entradas e saídas do sistema físico.

O método de Quasilinearização foi desenvolvido, originalmente, por Bellman e Kalaba (1965) e vários trabalhos subsequentes têm sido publicados sobre a aplicação da técnica. Entre eles podem ser citados o de Lee (1968); Lee e Hwang (1971), que estimaram parâmetros do modelo de Streeter-Phelps, através desse método; Haimés e Wismer (1971); Yeh e Tauxe (1971), que aplicaram para parâmetros de modelos de aquíferos; Cárdenas (1974), cujo trabalho identifica-se com o de Lee e Hwang. A técnica é tratada, detalhadamente, por Rinaldi et alii (1979), que a aplicaram em estudos de qualidade de água do rio Reno, utilizando, também, o modelo de Streeter-Phelps.

A técnica, segundo Haimes (1977) é aplicável nos seguintes casos:

1 - na solução de problemas não-lineares de valor inicial e de contorno,

2 - para identificação de parâmetros de sistemas de equações diferenciais ordinárias com condições iniciais desconhecidas, e

3 - para identificação de parâmetros de sistemas de equações diferenciais parciais com condições iniciais desconhecidas.

Esse algoritmo soluciona um sistema de equações diferenciais parciais ou ordinárias, não-lineares, linearizando-as primeiramente, para depois resolver, iterativamente, uma série de equações lineares representadas por problemas de valores iniciais.

Quando a sequência de problemas lineares com valores iniciais converge para a solução do problema não-linear original, isto acontece de uma forma quadrática; nisto se fundamenta a maior vantagem do método. A convergência quadrática significa que o erro na  $n$ -ésima iteração é proporcional ao quadrado do erro da iteração imediatamente anterior; ou seja;

$$\left\| x^{(n)} - x^{(obs)} \right\| \leq K \left\| x^{(n-1)} - x^{(obs)} \right\|^2 \quad (IV.1)$$

onde:

$x^{(obs)}$  = representa o valor observado da variável dependente, e

$K$  = é uma constante, independente do número da iteração ( $K < 1$ ).

Infelizmente essa convergência não é garantida e depende da aproximação inicial da variável. Se esta aproximação inicial é muito diferente da solução correta, o procedimento poderá divergir. Geralmente, a norma a ser minimizada deve ser convexa na faixa das soluções viáveis.

#### IV.2.2.1.2. Algoritmo do Método de Quasilinearização

Considerando os trabalhos desenvolvidos por Bellman e Kalaba (1965), Lee (1968) e Cárdenas (1974), será apresentado, a seguir, o algoritmo desenvolvido para o método de Quasilinearização.

Seja, o seguinte sistema de  $n$  equações diferenciais de 1ª ordem:

$$\dot{x}_i(t) = f_i[\bar{x}(t), \bar{u}(t), t] \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.2})$$

com as seguintes condições iniciais:

$$x_i(t_0) = x_i^0 \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \text{e} \quad t \in [t_0, T] \quad (\text{IV.3})$$

onde:

$x_i(t)$  = variáveis dependentes que representam a saída ou solução para o sistema, denominadas variáveis de estado.

$$\bar{x}(t) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)]^T,$$

$u_i(t)$  = variáveis de controle, conhecidas como quantidades de entrada.

$$\bar{u}(t) = \left[ u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t) \right]^T,$$

$f_i(.)$  = funções gerais que, por hipótese, satisfazem a certas condições mínimas que garantem a existência e unicidade das soluções do sistema e,

$$\dot{x}_i(t) \triangleq \frac{dx_i(t)}{dt}$$

As variáveis de estado são um número mínimo de quantidades que representam o comportamento passado do sistema; isto significa que a especificação do estado do sistema no tempo  $t_0$  e  $\bar{u}(t)$ ,  $t \geq t_0$ , são suficientes para especificar o comportamento das variáveis de estado em  $t \geq t_0$ .

Para o caso linear, isto é, quando as funções  $f_i[\bar{x}(t), \bar{u}(t), t]$  são lineares em  $\bar{x}(t)$  e  $\bar{u}(t)$ , o sistema tem a seguinte forma geral:

$$\dot{\bar{x}}(t) = A(t) \cdot \bar{x}(t) + B(t) \cdot \bar{u}(t) \quad (\text{IV.4})$$

$$\bar{x}(t_0) = \bar{x}^0 \quad (\text{IV.5})$$

onde:

$A(t)$  = matriz  $(n \times n)$  dos coeficientes, e

$B(t)$  = matriz  $(n \times m)$  dos coeficientes.

Uma equação diferencial de ordem  $n$ , poderá ser escrita como:

$$\frac{d^n x(t)}{dt} = f(x, \frac{dx}{dt}, \dots, \frac{d^{n-1} x}{dt^{n-1}}, u_1, \dots, u_m, t) \quad (\text{IV.6})$$

e na forma canônica, como:

Definindo:

$$\begin{aligned} x_1 &= x \\ x_2 &= \dot{x} \\ \vdots &\quad \vdots \\ x_n &= x^{(n-1)} \end{aligned} \quad (\text{IV.7})$$

onde:

$$x^{(n-1)} = \frac{d^{n-1} x}{dt^{n-1}} \quad (\text{IV.8})$$

Logo:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= x_3 \\ \vdots &\quad \vdots \\ \dot{x}_{n-1} &= x_n \end{aligned} \quad (\text{IV.9})$$

Um sistema de  $n$  equações diferenciais de 1ª ordem poderá ser representado, então, por:

$$\dot{x}_n = f(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, u_2, \dots, u_m, t) \quad (\text{IV.10})$$

Inserindo agora, os parâmetros,  $\bar{\alpha}$ , nas equações diferenciais não-lineares e admitindo-se que são desconhecidos, esses parâmetros poderão ser tratados como variáveis de estado, adicionando-se ao sistema, as equações diferenciais,  $\dot{\alpha} = 0$ .

O problema de identificação dos parâmetros é, dessa forma, equivalente a encontrar a condição inicial para a correspondente variável de estado.



Além de possuir parâmetros desconhecidos, o sistema pode ter, também, condições de contorno desconhecidas. Por exemplo, os valores de alguns componentes podem ser conhecidos no ponto inicial de contorno, e outros serem especificados somente no ponto final. Em outros casos, todos os dados disponíveis podem consistir de várias medidas de um determinado componente, com nenhuma informação sobre os demais. Seja qual for o caso, a Quasilinearização apresenta um meio para converter os problemas de valor de contorno multipontuais numa série de problemas de valor inicial, perfeitamente solucionados com o auxílio do computador.

Uma solução numérica aproximada do sistema de equações diferenciais não-lineares deve ser determinada para o intervalo de tempo  $[t_0, T]$ . Em particular, uma versão simplificada do sistema de equações pode ser solucionada, hipotizando-se as condições iniciais e/ou as de contorno, baseadas no conhecimento anterior do sistema físico a ser modelado.

Aplicando agora o algoritmo de Newton-Raphson às equações diferenciais não-lineares, com o objetivo de obter uma sequência de equações diferenciais lineares, cujas soluções devem convergir para a solução das equações não-lineares, teremos:

A solução procurada é a variável  $x = x(t)$ , no intervalo  $t \in [t_0, T]$ , tal que,  $dx/dt = f(x)$ . Dada a seguinte equação não-linear de uma variável:

$$\dot{x} = f(x, t) \quad (\text{IV.11})$$

e aplicando Newton-Raphson com  $x^{(0)}$  sendo uma condição inicial tomada, teremos:

$$f(x^{(1)}, t) \equiv f(x^{(0)}, t) + \nabla_x f(x^{(0)}, t) (x^{(1)} - x^{(0)}) \quad (\text{IV.12})$$

onde:

$$\nabla_x f \equiv \partial f / \partial x \quad (\text{IV.13})$$

Substituindo  $f(x^{(1)}, t) \equiv \dot{x}^{(1)}$ :

$$\dot{x}^{(1)} = f(x^{(0)}, t) + \nabla_x f(x^{(0)}, t) (x^{(1)} - x^{(0)}) \quad (\text{IV.14})$$

na n-ésima iteração:

$$\dot{x}^{(n)} = f(x^{(n-1)}, t) + \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) (x^{(n)} - x^{(n-1)}) \quad (\text{IV.15})$$

ou:

$$\dot{x}^{(n)} = f(x^{(n-1)}, t) + \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) x^{(n)} - \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) x^{(n-1)} \quad (\text{IV.16})$$

$$\dot{x}^{(n)} = \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) x^{(n)} + \left[ f(x^{(n-1)}, t) - \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) x^{(n-1)} \right] \quad (\text{IV.17})$$

Uma vez que se conhece  $x^{(n-1)}$  e, como resultado, são também conhecidos,  $f[x^{(n-1)}(t)]$  e  $\nabla_x f(x^{(n-1)}, t)$ , a equação diferencial obtida será da forma:

$$\dot{x}^{(n)}(t) = a(t) x^{(n)}(t) + b(t) \quad (\text{IV.18})$$

onde:

$$a(t) = \nabla_x f[x^{(n-1)}, t], \text{ e} \quad (\text{IV.19})$$

$$b(t) = f(x^{(n-1)}, t) - \nabla_x f(x^{(n-1)}, t) x^{(n-1)}(t) \quad (\text{IV.20})$$

A equação (IV.18) obtida desta forma, é uma equação diferencial linear, com coeficientes variáveis no tempo.

Este procedimento pode ser estendido para um sistema de n equações não-lineares de 1ª ordem:

$$\dot{\bar{x}} = f(\bar{x}, t) \quad (\text{IV.21})$$

com

$$\bar{x}(t_0) = \bar{x}^0 \quad (\text{IV.22})$$

Dadas as n equações diferenciais não-lineares:

$$\dot{x}_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, t) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.23})$$

Aplicando o método de Newton-Raphson, com  $\bar{x}^0$  assumido, teremos:

$$f_i(\bar{x}^{(1)}, t) = f_i(\bar{x}^{(0)}, t) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x}^{(0)}, t)}{\partial x_j} [x_j^{(1)} - x_j^{(0)}] \quad (\text{IV.24})$$

mas,

$$f_i(\bar{x}^{(1)}, t) \equiv \dot{x}_i^{(1)} \quad (\text{IV.25})$$

Substituindo (IV.25) em (IV.24), teremos:

$$\dot{x}_i^{(1)} = f_i(\bar{x}^{(0)}, t) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x}^{(0)}, t)}{\partial x_j} [x_j^{(1)} - x_j^{(0)}] \quad (\text{IV.26})$$

e para a n-ésima iteração:

$$\dot{x}_i^{(n)} = f_i(\bar{x}^{(n-1)}, t) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x}^{(n-1)}, t)}{\partial x_j} [x_j^{(n)} - x_j^{(n-1)}] \quad (\text{IV.27})$$

ou:

$$\dot{\bar{x}}_i^{(n)} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x}^{(n-1)}, t)}{\partial x_j} \cdot x_j^{(n)} + \left[ f_i(\bar{x}^{(n-1)}, t) - \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x}^{(n-1)}, t)}{\partial x_j} \cdot x_j^{(n-1)} \right] \quad (\text{IV.28})$$

A expansão de  $\bar{f}(\bar{x})$  em torno de  $\bar{x}^{(0)}$  é dada na forma vetorial da expressão de Newton-Raphson, como:

$$\bar{f}(\bar{x}, t) \cong \bar{f}(\bar{x}^{(0)}, t) + J(\bar{x}^{(0)}) (\bar{x} - \bar{x}^{(0)}) \quad (\text{IV.29})$$

A expressão (IV.29) é, essencialmente, uma expansão em séries de Taylor, sendo negligenciados os termos de segunda ordem e os de ordens mais altas. Se o valor de  $\bar{x}^{(0)}$  é conhecido, sendo obtido a partir de cálculos prévios, e o de  $\bar{x}$  é desconhecido, essa equação será sempre linear; sendo  $J(\bar{x}^{(0)})$  a matriz Jacobiana.

As equações diferenciais resultam em:

$$\dot{\bar{x}}^{(1)} = J(\bar{x}^{(0)}) \cdot \bar{x}^{(1)} + \bar{f}(\bar{x}^{(0)}, t) - J(\bar{x}^{(0)}) \cdot \bar{x}^{(0)} \quad (\text{IV.30})$$

o que leva à uma fórmula geral de recorrência, para  $\bar{x}^{(n)}$ :

$$\dot{\bar{x}}^{(n)} = J(\bar{x}^{(n-1)}) \cdot \bar{x}^{(n)} + \bar{f}(\bar{x}^{(n-1)}, t) - J(\bar{x}^{(n-1)}) \cdot \bar{x}^{(n-1)} \quad (\text{IV.31})$$

O sistema gerado será da forma:

$$\dot{\bar{x}}^{(n)} = A(t) \cdot \bar{x}^{(n)}(t) + \bar{B}(t) \quad (\text{IV.32})$$

onde:

$$A(t) = J \left[ \bar{x}^{(n-1)}(t) \right] \quad (\text{IV.33})$$

$$\bar{B}(t) = \bar{f}(\bar{x}^{(n-1)}, t) - J \left[ \bar{x}^{(n-1)}(t) \right] \cdot \bar{x}^{(n-1)}(t) \quad (\text{IV.34})$$

Se  $\bar{x}^{(n-1)}$ ,  $\bar{x}^{(n)}$  e  $\bar{f}$  são vetores de dimensão  $M$  com componentes  $x_1^{(n-1)}, x_2^{(n-1)}, \dots, x_M^{(n-1)}$ ;  $x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, \dots, x_M^{(n)}$  e  $\bar{f}_1, \bar{f}_2, \dots, \bar{f}_M$  respectivamente, com  $n$  significando a iteração, a matriz Jacobiana,  $J \left[ \bar{x}^{(n)} \right]$ , será da forma:

$$J \left[ \bar{x}^{(n)} \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, & \dots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_M} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}, & \dots, & \frac{\partial f_2}{\partial x_M} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_M}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_M}{\partial x_2}, & \dots, & \frac{\partial f_M}{\partial x_M} \end{bmatrix} \quad \bar{x} = \bar{x}^{(n)} \quad (\text{IV.35})$$

Uma vez que não são conhecidas nenhuma das condições iniciais, para solucionar  $n$  equações lineares simultâneas são necessários n conjuntos de soluções homogêneas não-triviais e distintas e um conjunto de soluções particulares (Lee, 1968).

Sendo a equação diferencial original aproximada a uma linear, pode ser agora empregado o Princípio da Superposição, ou seja, a solução total do sistema pode ser encontrada somando-se a solução particular a uma combinação linear das soluções homogêneas. Desta forma, as soluções parciais podem ser obtidas individualmente e combinadas posteriormente. Isto não pode ser fei

to para um sistema não-linear.

A expressão para a solução total,  $\bar{x}(t)$ , poderá, então, ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{x}(t) = \bar{x}^p(t) + \sum_{i=1}^n x_i(0) \cdot \bar{x}_i^h(t) \quad (\text{IV.36})$$

A função  $\bar{p}(t)$  é a solução particular, ou seja, a trajetória seguida pelo sistema quando todas as condições iniciais são zero e é aplicada uma entrada.

Isto é,  $\bar{p}(t)$  é a solução de:

$$\dot{\bar{x}}^p(t) = A(t) \cdot \bar{x}^p(t) + \bar{B}(t) \quad (\text{IV.37})$$

com:

$$\bar{x}^p(0) = \bar{0} \quad (\text{IV.38})$$

A  $i$ -ésima solução homogênea,  $\bar{h}^i(t)$ , é a trajetória seguida pelo sistema quando o  $i$ -ésimo componente do vetor de condições iniciais é igual a 1, todos os outros componentes são iguais a zero, e nenhuma entrada é aplicada.

Logo,  $\bar{h}^i(t)$  é a solução de:

$$\dot{\bar{x}}^h(t) = A(t) \cdot \bar{x}_i^h(t) \quad (\text{IV.39})$$

com:

$$\bar{x}_{ij}^h(0) = \delta_{ij} \quad (\text{IV.40})$$

onde  $\delta_{ij}$  é a função delta de Kronecker; isto é,  $\delta_{ij}=0$ , se  $i \neq j$  e  $\delta_{ij}=1$ , se  $i=j$ .

A aproximação linear para  $\dot{\bar{x}}^h(t) = \bar{f}(\bar{x}^{(n)})$  é resolvida (n+1) vezes para obter as soluções particulares e homogêneas.

A solução total  $\bar{x}^{(n)}(t)$  é expressa em termos das condições iniciais desconhecidas,  $x_1^{(n)}(0)$ .

As soluções particulares e homogêneas são resolvidas, separadamente, utilizando-se um método numérico de integração, tal como Runge-Kutta e o método de Hamming.

No método de Quasilinearização, a norma utilizada é a soma quadrada dos erros. Esta soma é tomada sobre cada tempo de amostragem e sobre cada componente onde são disponíveis tais observações. Para simplificar, assumindo que somente o primeiro componente de  $x$  foi medido  $J$  vezes,  $t_1, t_2, \dots, t_J$ :

Os valores observados são assinalados com um sinal circunflexo ( $\hat{\phantom{x}}$ ):

$$\hat{x}_1(t_j) \quad j = 1, 2, \dots, J$$

A norma dos mínimos quadrados pode ser escrita como:

$$S = \|\hat{\bar{x}}(t_j) - \bar{x}(t_j)\| \quad (\text{IV.41})$$

por exemplo:

$$S = \sum_{j=1}^J \left[ \hat{x}_1(t_j) - x_1(t_j) \right]^2 \quad (\text{IV.42})$$

Pelo princípio da superposição, o valor calculado, correspondente a  $\hat{x}_1(t_j)$ , é expresso como uma combinação linear da forma:

$$x_1(t_j) = x_1^p(t_j) + \sum_{k=1}^n x_k(0) \cdot x_{1k}^h(t_j) \quad (\text{IV.43})$$

Uma vez que já foram calculadas e armazenadas as soluções particulares e homogêneas, os valores de  $x_1^p(t_j)$  e de  $x_{1k}^h(t_j)$  são conhecidos, e parte ou todos os  $x_k(0)$ , com  $k=1,2,\dots,n$  são ainda desconhecidos.

Substituindo o correspondente  $x_1(t_j)$  na norma dos mínimos quadrados, teremos:

$$S = \sum_{j=1}^J \left\{ \hat{x}_1(t_j) - \left[ x_1^p(t_j) + \sum_{k=1}^n x_k^o \cdot x_{1,k}^h(t_j) \right] \right\}^2 \quad (\text{IV.44})$$

O próximo passo, seria então minimizar a norma (equação (IV.44) em relação às condições iniciais desconhecidas (e parâmetros). O uso do método de mínimos quadrados simplifica o problema da otimização.

Assim, é encontrado um ponto de estacionaridade da função de erro,  $S$ , calculando-se as derivadas parciais com relação às  $n$  condições iniciais ou parâmetros desconhecidos, e igualando, cada uma dessas expressões, a zero.

A norma de identificação é quadrática, ou seja, pode ter apenas um ponto de estacionaridade, e se a derivada é definida e positiva, o ponto representará um mínimo. Esse ponto mínimo é, então, encontrado, solucionando-se o sistema formado por  $N$  equações algébricas com  $N$  incógnitas.

Diferenciando a norma  $S$  em relação às incógnitas,  $x_k^o$ ,



Obtêm-se:

$$\frac{\partial S}{\partial x_k^0} = \sum_{j=1}^J 2 x_{1k}^h(t_j) \left\{ \hat{x}_1(t_j) - \left[ x_1^p(t_j) + \sum_{i=1}^n x_i^0 \cdot x_{1i}^h(t_j) \right] \right\}$$

$$k = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.45})$$

Igualando  $\partial S / \partial x_k^0 = 0$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ , estas  $n$  equações podem ser rearranjadas com as incógnitas do lado esquerdo e as constantes do direito, como segue:

$$\sum_{j=1}^J x_{1k}^h(t_j) \cdot \left[ \sum_{i=1}^n x_i^0 \cdot x_{1i}^h(t_j) \right] = \sum_{j=1}^J x_{1k}^h(t_j) \left[ x_1^p(t_j) - \hat{x}_1(t_j) \right]$$

$$k = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.46})$$

ou na forma matricial, como  $A\bar{x} = \bar{b}$ , com os componentes dados por:

$$A = \{a_{ik}\} \quad (\text{IV.47})$$

$$a_{ik} = \sum_{j=1}^J x_{1i}^h(t_j) \cdot x_{1k}^h(t_j) \quad i, k = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.48})$$

$$\bar{x} = \left[ x_1(0), x_2(0), \dots, x_n(0) \right]^T \quad (\text{IV.49})$$

$$\bar{b} = \left[ b_1, b_2, \dots, b_n \right]^T \quad (\text{IV.50})$$

onde:

$$b_i = \sum_{j=1}^J x_{1i}^h(t_j) \cdot \left[ x_1^p(t_j) - \hat{x}_1(t_j) \right] \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV.51})$$

O sistema algébrico de equações,  $A\bar{x} = \bar{b}$ , pode ser resolvido numericamente, utilizando-se, por exemplo, o Método de Eliminação de Gauss, para se encontrar as condições iniciais e os

parâmetros,  $x_k^0$ , que forneçam o melhor ajuste com os dados observados.

Um teste de convergência poderá ser efetuado neste ponto para verificar se o critério de erro é razoavelmente pequeno. Se for satisfeito, o procedimento terminará; se não for esse o caso, deverá ser efetuada nova iteração. A nova iteração consistirá em se solucionar, mais uma vez, as equações linearizadas, só que agora, com os novos conjuntos de condições iniciais obtidos. A solução obtida deverá ser armazenada, para servir de condição inicial para os próximos passos, e assim, sucessivamente, até que seja alcançada uma diferença mínima, pré-estabelecida, entre os valores calculados e os observados.

Em resumo, o algoritmo para o método de Quasilinearização, poderá ser descrito, de uma forma sucinta, em oito passos, a saber:

1. Transformar o sistema de equações diferenciais ordinárias para a forma canônica.

2. Determinar uma solução aproximada (trajetória),  $\bar{x}^{(n)}(t)$  com  $t \in [0, T]$ , para o sistema de equações diferenciais não-lineares. Essa determinação é feita como uma hipótese inicial ou resolvendo as mais recentes aproximações lineares com as condições iniciais atualizadas.

3. Linearizar as equações diferenciais não-lineares em torno das soluções aproximadas  $\bar{x}^{(n)}(t)$  e calcular os termos  $\bar{J}(\bar{x}^{(n)})$  e  $\bar{f}(\bar{x}^{(n)})$ , que fornecem os coeficientes da equação diferencial linear.

4. Integrar as equações particulares e homogêneas, obtidas da aproximação linear, armazenando os valores das soluções, a cada tempo de observação. A integração será feita através de método numérico como, por exemplo, O Método de Runge-Kutta, sugerido por Haimes (1977) e Lee e Hwang (1971).

5. Compor a função objetivo, utilizando a norma dos mínimos quadrados.

6. Minimizar a função objetivo aplicando as condições necessárias de estacionaridade. Isso leva a um sistema linear de equações algébricas com parâmetros desconhecidos, ou seja, esse passo avalia os coeficientes  $a_{ik}$  e  $b_i$  (parâmetros) que figuram no sistema algébrico resultante do problema de mínimos quadrados.

7. Solucionar o sistema linear de equações algébricas para obter a aproximação seguinte das condições iniciais e dos parâmetros desconhecidos. É sugerido por Haimes (1977) o Método de Eliminação de Gauss.

8. Testar a convergência, avaliando a diferença (erro) entre os valores calculados e observados. Se obedecer a uma certa tolerância, o procedimento estará terminado; se não, volta-se ao passo 2 para uma nova iteração.

#### IV.3. Validação

Como já abordado na seção IV.1, a validação de um modelo é um passo indispensável para sua construção e sua confiabilidade.

Um bom ajuste para uma série isolada de observações, não é suficiente; particularmente se existirem muitos parâmetros a serem ajustados.

Faz-se necessário verificar se um modelo está apto a reproduzir medidas tomadas independentemente daquelas utilizadas na estimativa dos parâmetros. Para isso, toma-se usualmente, um outro conjunto de dados disponíveis e com eles é feita uma nova aplicação do modelo. Se os resultados não forem satisfatórios, a estrutura geral do modelo deverá ser revista, caso contrário; se esses resultados apresentam um bom ajuste em relação aos dados utilizados nessa nova condição, o modelo é considerado verificado ou validado.

Um modelo de balanço de massa, verificado, pode ser então utilizado para prever as condições do rio sob várias cargas poluidoras e sob situações que não sejam muito diferentes das condições utilizadas na calibração. Tais previsões são bastante úteis para o gerenciamento e determinação das melhores estratégias que propiciem o aperfeiçoamento da qualidade da água e minimizem os riscos envolvidos.

## CAPÍTULO V

## V. MODELO DE QUALIDADE DE ÁGUA QUAL-II/SEMCOG

## V.1. Introdução

O QUAL-II/SEMCOG (1977) é uma versão do QUAL-II (1973) como já foi discutido no item III.1.4. Representa um substancial melhoramento da versão prévia do modelo, sendo as diferenças mais significativas entre os dois, as seguintes:

1. Opção de unidades inglesas ou métricas nos dados de entrada.
2. Opção de unidades inglesas ou métricas nos dados de saída independente da escolha das unidades de entrada.
3. Opção em especificar as propriedades hidráulicas do canal, podendo-se escolher entre canais trapezoidais ou curvas chaves (vazão x profundidade e vazão x velocidade).
4. Opção para utilizar o método computacional de Tsivoglou no cálculo da reaeração.
5. Foram aprimoradas as rotinas de impressão.
6. Foram refinadas as rotinas para simulação permanente da temperatura.

O modelo QUAL-II/SEMCOG consiste num programa principal, ao qual, são acopladas 23 rotinas diferentes. A Figura V.1.

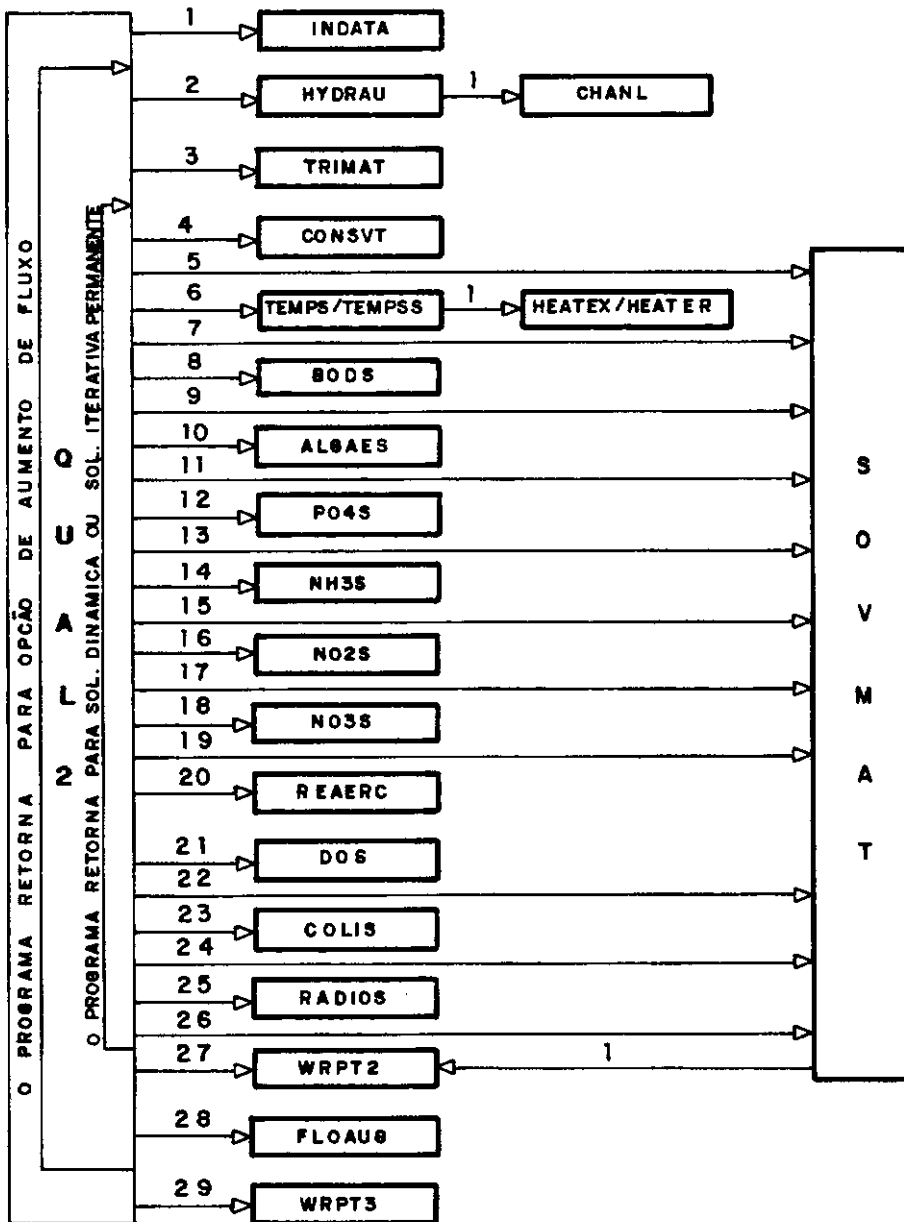


FIG. V.1 - ESTRUTURA GERAL DO MODELO QUAL - II / SEMCOG. (Roesner et alii, 1977)

ilustra as relações funcionais entre o programa principal e as rotinas. A versão original do QUAL-II foi estruturada de modo a permitir fácil adição de parâmetros através de novas rotinas a serem inseridas no modelo.

Para a aplicação do mesmo, faz-se necessário que o rio, a ser simulado, seja dividido em trechos, os quais, devem ter características hidráulicas uniformes. Cada trecho é subdividido em "elementos computacionais" de comprimentos iguais. No total, podem ser utilizadas sete diferentes tipos de elementos computacionais; são eles (Figura V.2):

- fonte de cabeceira - primeiro elemento do sistema principal e, eventualmente, de cada tributário.
- elemento padrão - todo aquele que não tiver entradas além das incrementais.
- elemento à montante de uma junção
- junção
- despejo
- retirada
- último elemento do sistema

## V.2. Constituintes Simulados

O QUAL-II/SEMOG é um modelo matemático determinístico unidimensional de qualidade de água.

É classificado como quasi-dinâmico uma vez que somente os dados meteorológicos fornecidos podem ser dinâmicos; o que

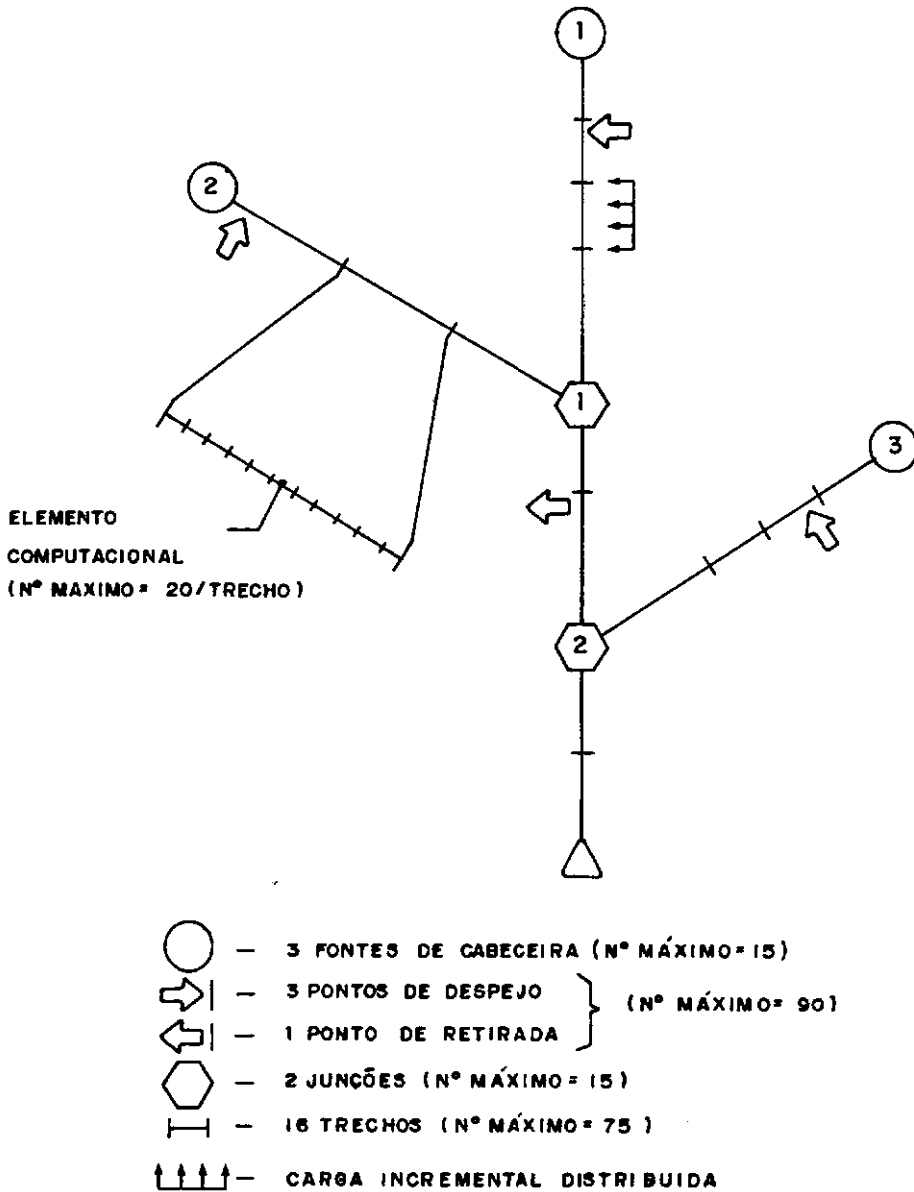


FIG. V. 2 - DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DE UM SISTEMA HIPOTÉTICO E SUAS LIMITAÇÕES. (Roesner et alii, 1977)



afeta diretamente a temperatura e as algas, e indiretamente, os outros constituintes simulados.

Resumindo, o modelo pode ser operado tanto como permanente quanto dinâmico. Hidraulicamente fornece soluções permanentes e quando operado na forma dinâmica, torna possível o estudo da qualidade da água, primariamente oxigênio dissolvido e temperatura, e como esta é afetada pelas variações diurnas inseridas nos dados metereológicos.

O modelo simula as variações espaciais e temporais de treze constituintes, considerando os processos de transporte e depuração da substância.

Podem ser simulados pelo QUAL-II/SEMOG os seguintes constituintes:

- Oxigênio dissolvido
- Demanda bioquímica de oxigênio (carbonácea)
- Temperatura
- Algas (fotossíntese e respiração)
- Amônia
- Nitrito
- Nitrato
- Fósforo
- Coliformes fecais
- Um constituinte não-conservativo arbitrário
- Tres constituintes conservativos

O modelo também possui a opção de cálculo de vazões extras para diluição quando um nível mínimo, pré-fixado, de oxi-

gênio dissolvido não for alcançado.

Para o caso específico da demanda bioquímica de oxigênio e do oxigênio dissolvido, analisa a biodegradação da matéria carbonácea, demanda bêntica e sedimentação da matéria orgânica.

A Figura V.3 descreve as principais interações entre os constituintes simulados pelo modelo.

### V.3. Limitações do Modelo

Mesmo sendo um modelo bastante atual e com vários recursos, o QUAL-II/SEMOG apresenta algumas limitações. Uma delas reside no fato de ser unidimensional; ou seja, assume que os principais mecanismos de transporte, advecção e dispersão, são significativos apenas ao longo da direção principal de fluxo (eixo longitudinal do rio ou canal). Além disso, o modelo se apresenta como quase-dinâmico, só operando dinamicamente quando lida com dados meteorológicos, possibilitando, assim, o estudo das variações diurnas na qualidade da água.

O programa, apesar de ser bem geral, possui certas limitações dimensionais, permitindo os seguintes valores máximos (Figura V.2):

- Número de trechos = 75
- Número de elementos computacionais = 500
- Número de elementos de cabeceira = 15
- Número de junções = 15

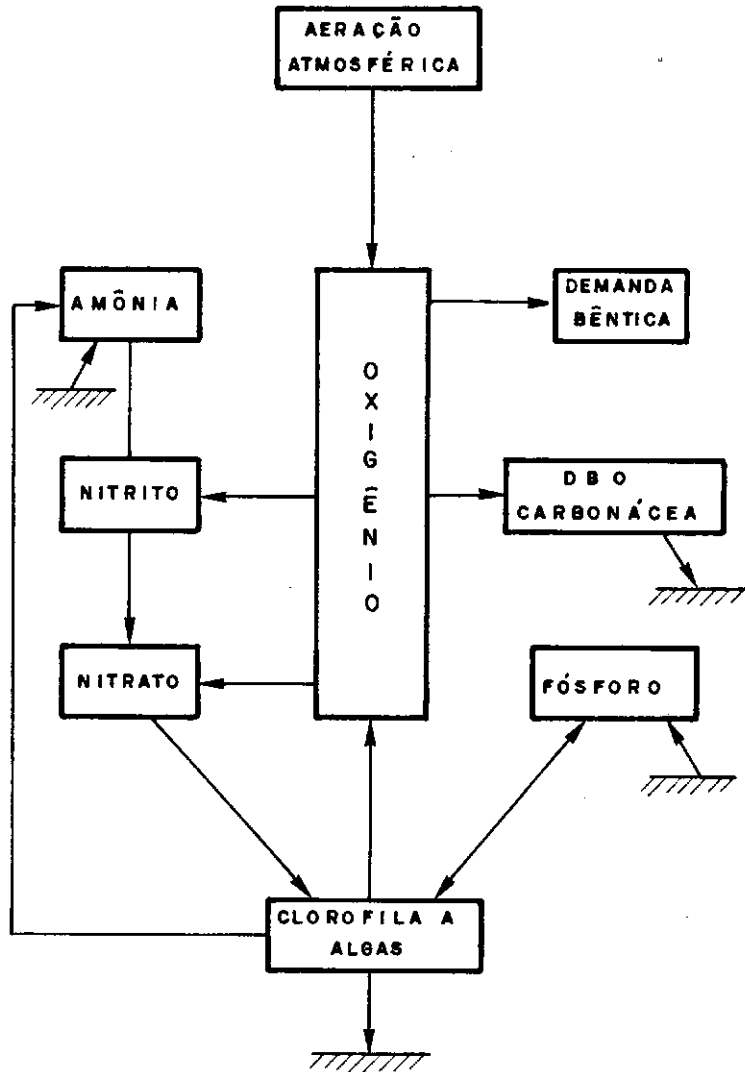


FIG. V.3 - PRINCIPAIS INTERAÇÕES ENTRE OS CONSTITUINTES. (Roesner et alii, 1977)

- Número de despejos e retiradas = 90

#### V.4. Equações Básicas

A equação básica solucionada pelo QUAL-II/SEMCOG é a equação de transporte de massa (advecção-dispersão), que é integrada numericamente num determinado período de tempo, para cada constituinte simulado.

Esta equação inclui os efeitos de diluição, advecção, dispersão, reações e interações dos constituintes, fontes e consumidores de oxigênio.

Para qualquer constituinte, C, a equação poderá ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial (A_x \cdot D_L \cdot \frac{\partial C}{\partial x})}{A_x \cdot \partial x}}_1 - \underbrace{\frac{\partial (A_x \cdot \bar{u} C)}{A_x \cdot \partial x}}_2 + \underbrace{\frac{dC}{dt}}_3 + \underbrace{\frac{S}{V}}_4 \quad (V.1)$$

onde:

t = tempo (T),

x = distância (L),

C = concentração ( $ML^{-3}$ ),

$A_x$  = área da seção transversal ( $L^2$ ),

$D_L$  = coeficiente de dispersão ( $L^2T^{-1}$ ),

$\bar{u}$  = velocidade média ( $LT^{-1}$ ), e

S = fontes ou consumidores externos ( $MT^{-1}$ )

Os termos 1, 2, 3 e 4 representam respectivamente, dispersão, advecção, mudanças no constituinte, fontes/consumidores, e diluição.

O termo  $dC/dt$  se refere somente às trocas internas do constituinte tais como crescimento e decaimento, e não deve ser confundido com o termo  $\partial C/\partial t$ , o gradiente de concentração local.

A Tabela V.1 apresenta um sumário das equações de todos os parâmetros simulados pelo modelo com exceção da temperatura.

## V.5. Solução Numérica

As equações diferenciais do modelo (Tabela V.1) são resolvidas numericamente por diferenças finitas, através de um esquema implícito regressivo. (Fried, 1975).

A base geral para este esquema consiste em se encontrar o valor da variável (concentração do constituinte), como função do espaço num certo tempo, uma vez conhecida a distribuição espacial num tempo anterior.

O tempo zero corresponde à condição inicial.

O esquema implícito regressivo é caracterizado pelo fato de que todas as derivadas espaciais ( $\partial/\partial x$ ) são aproximadas na forma de diferenças no tempo  $n+1$ .

Material Conservativo (C)	$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial C}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uC)}{A_x \partial x} + \frac{S_C}{A_x dx}$
Algas (A)	$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial A}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uA)}{A_x \partial x} + \frac{S_A}{A_x dx} + (\mu - \rho - \frac{\sigma_1}{d}) A$
Amônia (N <sub>1</sub> )	$\frac{\partial N_1}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial N_1}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uN_1)}{A_x \partial x} + \frac{SN_1}{A_x dx} + (\alpha_1 \rho A - \beta_1 N + \frac{\sigma_3}{A_x})$
Nitrito (N <sub>2</sub> )	$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial N_2}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uN_2)}{A_x \partial x} + \frac{SN_2}{A_x dx} + (\beta_1 N_1 - \beta_2 N_2)$
Nitrato (N <sub>3</sub> )	$\frac{\partial N_3}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial N_3}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uN_3)}{A_x \partial x} + \frac{SN_3}{A_x dx} + (\beta_2 N_2 - \alpha_1 \mu A)$
Ortofosfato Dissolvido (P)	$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial P}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uP)}{A_x \partial x} + \frac{S_P}{A_x dx} + (\alpha_2 (\rho - \mu) A - \frac{\alpha_2}{A_x})$
Demanda Bioquímica de Oxigênio (L)	$\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial L}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uL)}{A_x \partial x} + \frac{S_L}{A_x dx} - (K_1 + K_3) L$
Oxigênio Dissolvido (φ)	$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial \phi}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x u\phi)}{A_x \partial x} + \frac{S_\phi}{A_x dx} + \left[ K_2 (\phi^* - \phi) + (\alpha_3 \mu - \alpha_4 \rho) A - K_1 L - \frac{K_4}{A_x} - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2 \right]$
Coliformes (F)	$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial F}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uF)}{A_x \partial x} - \frac{S_F}{A_x dx} - K_5 F$
Material Não-Conservativo (R)	$\frac{\partial R}{\partial t} = \frac{\partial (A_x D_L \frac{\partial R}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial (A_x uR)}{A_x \partial x} - \frac{S_R}{A_x dx} - K_6 R$

TABELA V.1 - Equações Diferenciais Solucionadas pelo Modelo QUAL-II/SEMCOG

A Figura V.4 ilustra o esquema de diferenças finitas, considerando a concentração do constituinte em quatro pontos (esquema mnemônico). São requeridos três pontos no tempo  $n + 1$  para aproximar as derivadas espaciais. A derivada temporal é aproximada num certo espaço  $i$ .

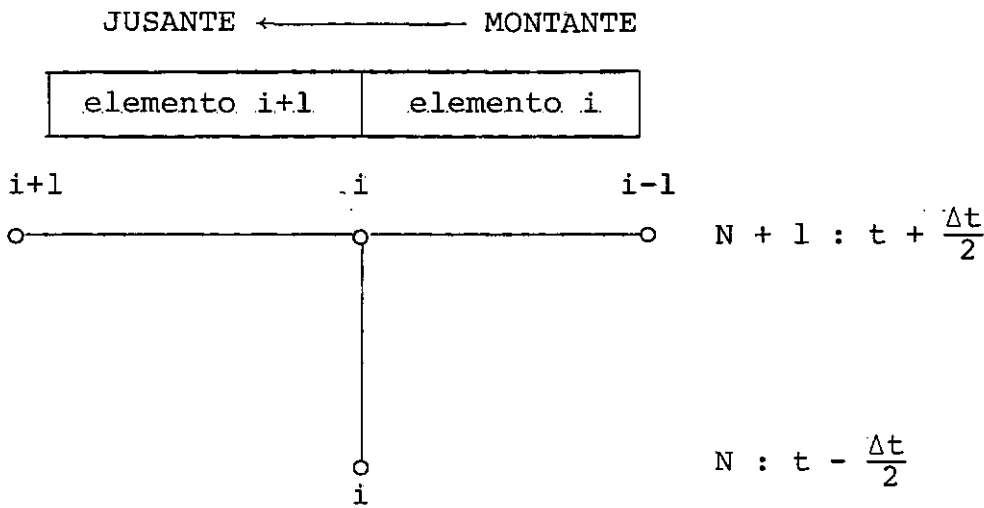


FIGURA V.4 - Esquema Implícito Clássico

A conceitualização do sistema é apresentada na Figura V.5. É representada por trechos divididos em sub-trechos de comprimento  $\Delta x$ . Para cada um destes elementos computacionais, o balanço hidrológico pode ser escrito em termos de vazões de entrada ( $Q_{i-1}$ ), fontes ou retiradas externas ( $Qx_i$ ) e de vazões de saída ( $Q_i$ ). Da mesma forma, o balanço de material para qualquer constituinte poderá ser obtido.

Temos então o transporte ( $Q.C$ ), a dispersão  $\left[ \bar{A}(D_L/\Delta_x) \left( \partial C / \partial x \right) \right]$ , a massa adicionada pelos despejos ( $Qx.Cx$ ) e a massa adicionada ou removida por fontes ou retiradas internas ( $S_i$ ) no volume de controle.

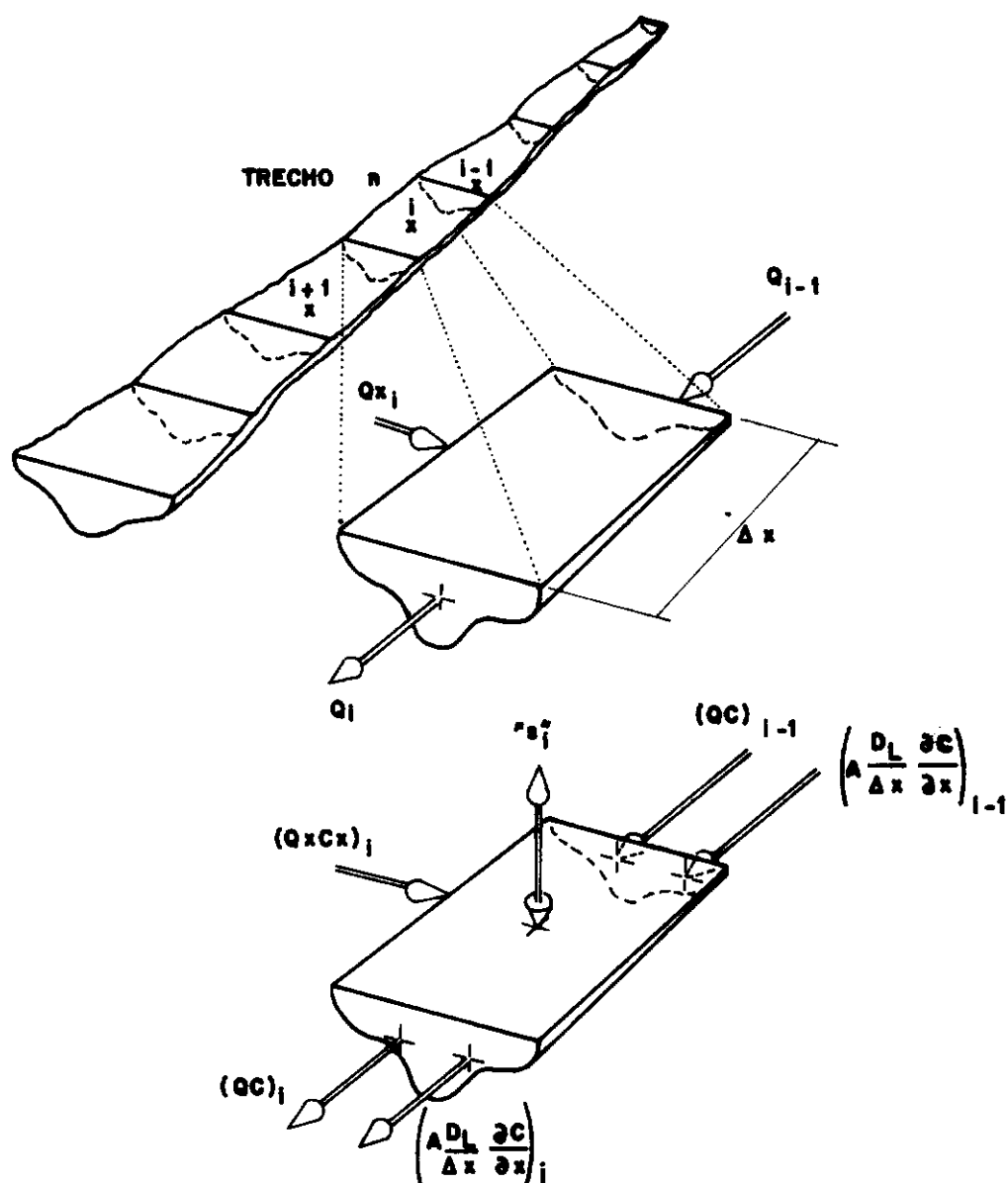


FIG. 5.5 - DISCRETIZAÇÃO DO SISTEMA DE RIO. ( Roesner et alii, 1977 )



De posse destes elementos e denominando " $S_i$ " como sendo a soma da produção e consumo de oxigênio no ponto espacial " $i$ ", o esquema implícito regressivo, de aproximação por diferenças, pode ser aplicado à equação (V.1) em duas partes:

Primeiro, os termos de advecção e difusão são diferenciados em relação a  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} = & \frac{(A D_L \frac{\partial C}{\partial x})_i - (A D_L \frac{\partial C}{\partial x})_{i-1}}{V_i} - \frac{(A \bar{u} C)_i - (A \bar{u} C)_{i-1}}{V_i} + \\ & + \frac{dC_i}{dt} + \frac{S_i}{V_i} \end{aligned} \quad (V.2)$$

onde:

$$V_i = A_i \cdot \Delta x_i$$

Segundo, expressando as derivadas parciais dos termos de difusão em diferenças finitas e daí as derivadas temporais de  $C$  em diferenças finitas:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = & \left\{ \frac{[(A D_L)_i] \cdot C_{i+1}^{n+1} - [(A D_L)_i] C_i^{n+1}}{V_i \Delta x_i} - \right. \\ & \left. - \frac{[(A D_L)_{i-1}] C_i^{n+1} - [(A D_L)_{i-1}] C_{i-1}^{n+1}}{V_i \Delta x_i} \right\} - \\ & - \left\{ \frac{Q_i C_i^{n+1} - Q_{i-1} C_{i-1}^{n+1}}{V_i} \right\} + r_i C_i^{n+1} + p_i + \frac{S_i}{V_i} \end{aligned} \quad (V.3)$$

Na equação (V.3), o termo  $dC/dt$  é expresso como:

$$\frac{dC_i}{dt} = r_i \cdot C_i^{n+1} + p_i \quad (V.4)$$

onde:

$r_i$  = taxa constante, e

$p_i$  = fonte ou consumidor interno do constituinte (por exemplo, perda de nutriente devido ao crescimento de algas)

Reordenando a equação (V.3) em relação aos coeficientes  $C_{i-1}^{n+1}$ ,  $C_i^{n+1}$ ,  $C_{i+1}^{n+1}$ , obtém-se a seguinte equação:

$$a_i \cdot C_{i-1}^{n+1} + b_i \cdot C_i^{n+1} + c_i \cdot C_{i+1}^{n+1} = z_i \quad (V.5)$$

onde:

$$a_i = - \left[ (A D_L)_{i-1} \frac{\Delta t}{V_i \Delta x_i} + \frac{Q_{i-1} \Delta t}{V_i} \right], \quad (V.6)$$

$$b_i = 1.0 + \left[ (A D_L)_i + (A D_L)_{i-1} \right] \frac{\Delta t}{V_i \Delta x_i} + Q_i \frac{\Delta t}{V_i} - r_i \Delta t, \quad (V.7)$$

$$c_i = - \left[ (A D_L)_i \frac{\Delta t}{V_i \Delta x_i} \right] e \quad (V.8)$$

$$z_i = C_i^n + \frac{S_i \Delta t}{V_i} + p_i \Delta t \quad (V.9)$$

Os coeficientes  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  e  $z_i$  são conhecidos no tempo  $n$ , enquanto os termos  $C_i^{n+1}$  são desconhecidos no tempo  $n+1$ .

Aplicando a equação (V.5) em cada trecho do rio em questão, resultam  $L-2$  equações, sendo  $L$  o número de seções. São acrescentadas mais duas equações pelas condições de contorno de montante e jusante.

O conjunto formado por  $L$  equações a  $L$  incógnitas é um sistema de equações lineares onde a matriz dos coeficientes é tridiagonal.

O sistema de equações é resolvido pelo método descrito por Ralston e Wilf (1960) em cada intervalo de tempo e se apresenta da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_i & b_i & c_i \\ & & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & a_{L-1} & b_{L-1} & c_{L-1} \\ & & & & & & a_L & b_L \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ C_3^{n+1} \\ \vdots \\ C_i^{n+1} \\ \vdots \\ C_{L-1}^{n+1} \\ C_L^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \\ \vdots \\ Z_i \\ \vdots \\ Z_{L-1} \\ Z_L \end{bmatrix} \quad (V.10)$$

As fórmulas de resolução são:

$$C_i^{n+1} = G_i - W_i \cdot C_{i+1}^{n+1}, \quad i = L-1, L-2, \dots, 1 \quad (V.11)$$

onde:

$$W_i = \frac{c_i}{b_i - a_i \cdot W_{i-1}}, \quad i = 2, 3, \dots, L \quad (V.12)$$

$$G_i = \frac{Z_i - a_i \cdot G_{i-1}}{b_i - a_i \cdot W_{i-1}} \quad (V.13)$$

$$\begin{cases} G_1 = Z_1/b_1 & \text{e} & G_L = C_L^{n+1} \\ W_1 = c_1/b_1 \end{cases} \quad (V.14)$$

Segundo o QUAL-I (1971), o modelo leva à estabilização dos perfis de concentração quando o tempo de cálculo excede o tempo viagem do trecho em estudo. Fisicamente, este tempo significa o tempo total que levaria uma partícula para se deslocar do início ao fim do trecho, ou seja, percorrer toda a sua extensão.

Se o tempo de cálculo ultrapassar o tempo de viagem e se, ainda, as variações das entradas foram contínuas ou periódicas, o perfil final independerá das condições iniciais dos trechos.

Ainda é sugerida a escolha criteriosa para  $\Delta t$  e  $\Delta x$  apesar de não haver restrições quanto à estabilidade da solução da equação (V.5). Stone e Brian (1963) sugerem utilizar, para garantir bons resultados, a seguinte relação:

$$\bar{u} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (V.15)$$

#### V.6. Dados Necessários

O programa do QUAL-II/SEMOG necessita de uma série de dados de entrada, específicos quanto às características hidráulicas e de qualidade da água do sistema de rio ou canal. Para o cálculo das concentrações de OD e DBO carbonácea, são necessários os seguintes dados:

- Número de trechos, suas extensões e número de elementos computacionais por trecho
- Número de fontes de cabeceira, despejos e/ou reti-

radas, e de junções.

- Vazões de montante

- Temperatura, OD e DBO iniciais nas cabeceiras, nos despejos e retiradas e no escoamento superficial.

- Coeficientes tais como  $K_1$  (desoxigenação),  $K_2$  (reação),  $K_3$  (sedimentação),  $K_4$  (carga bêntica),  $\alpha_3$  (fotossíntese de algas),  $\alpha_4$  (respiração de algas),  $\alpha_5$  (oxidação da  $NH_3$ ),  $\alpha_6$  (oxidação do  $NO_2$ ),  $\beta_1$  (oxidação da  $NH_3$  para  $NO_2$ ),  $\beta_2$  (oxidação do  $NO_2$  para  $NO_3$ ),  $\mu$  (taxa de crescimento das algas) e  $\beta$  (taxa de respiração das algas), em todos os trechos.

- Concentração de algas (biomassa), Amônia, Nitrito e Nitrato, nas condições iniciais e incrementais, em todos os trechos.

- Coeficientes hidráulicos.

As vazões de montante são consideradas constantes, sendo que as variações (aumento e redução) são devidas às entradas (despejos, tributários) e retiradas (captações).

Sendo o modelo confeccionado em rotinas estanques, a não simulação de um determinado constituinte, por falta de dados (como por exemplo, algum coeficiente mencionando, específico para cada caso) não afetará a simulação dos demais.

## V.7. Cálculos dos Parâmetros

O QUAL-II/SEMCOG assume que o regime hidráulico do rio ou canal é permanente; ou seja,  $\partial Q / \partial t = 0$ , por conseguinte, o

balanço hidrológico, para um elemento computacional, poderá ser escrito como (Figura V.4):

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_i = (Q_x)_i \quad (V.16)$$

onde  $(Q_x)_i$  é a soma das entradas e/ou retiradas externas para este elemento.

Uma vez solucionada a equação acima para  $Q$ , as outras características hidráulicas são então obtidas a partir das relações:

$$\bar{u} = a \cdot Q^b \quad (V.17)$$

$$A_x = Q/\bar{u} \quad (V.18)$$

$$h = c \cdot Q^d \quad (V.19)$$

onde:  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  são constantes usualmente determinadas a partir de curvas-chave,  $\bar{u}$  é a velocidade média,  $A_x$  é a área da seção transversal,  $h$  a profundidade média e  $Q$ , a vazão média no trecho.

Alternativamente, se são disponíveis dados da seção transversal em função da profundidade,  $\bar{u}$  poderá ser obtido a partir da vazão ( $Q$ ) e da equação de Manning, da seguinte forma:

$$Q = \frac{1,486}{n} \cdot A_x \cdot R_x^{2/3} \cdot S_e^{1/2} \quad (V.20)$$

onde:

$R_x$  = raio hidráulico

$n$  = coeficiente de Manning

$S_e$  = declividade da linha de energia

O valor de  $\bar{u}$  é então determinado pela equação (V.18):

O coeficiente de dispersão longitudinal,  $D_L$ , é calculado no modelo através da seguinte equação empírica (QUAL-I, 1971):

$$D_L = 22,6 \cdot n \cdot \bar{u} \cdot h^{0,833} \quad (V.21)$$

Quanto ao coeficiente de reaeração,  $K_2$ , o modelo possui a opção de ler diretamente os valores medidos, ou calcular por várias fórmulas empíricas, relacionadas com as características e geometria do canal. As fórmulas são do tipo:

$$K_2 = \frac{a_1 \cdot u^{b_1}}{h^{c_1}} \quad (V.22)$$

ou

$$K_2 = a_2 \cdot Q^{b_2} \quad (V.23)$$

Os valores de  $a_1$ ,  $b_1$  e  $c_1$  variam de acordo com cinco autores diferentes. As equações utilizadas, em base e, para  $K_2$  a  $20^\circ\text{C}$ , em unidades inglesas, são apresentadas na tabela V.2.

Além dessas fórmulas, o QUAL-II/SEMOG apresenta a opção de cálculo de  $K_2$  através da fórmula de Tzivoglou - Wallace (1972), que estabelece que este coeficiente é proporcional à mudança de elevação da superfície da água, e inversamente proporcional ao tempo de viagem através do trecho. Temos então:

$$K_2 = K \cdot \left( \frac{\Delta h}{t_f} \right) \quad (V.32)$$

onde:

$K$  = constante de proporcionalidade ( $L^{-1}$ )

PESQUISADORES	EQUAÇÕES	NÚMERO
Churchill, Elmore e Buckingham (1962)	$K_2 = 11,57 \cdot \bar{u}^{0,969} \cdot h^{-1,673}$	V.24
O'Connor e Dobbins (1958)	$K_2 = (D_m \cdot \bar{u})^{0,5} \cdot h^{-1,5}$ $D_m = 1,91 \cdot 10^3 \cdot (1,037)^{T-20}$	V.25 V.26
Owens, Edwards e Gibbs (1964)	$K_2 = 21,7 \cdot \bar{u}^{0,67} \cdot h^{-1,85}$	V.27
Tackston e Krenkel (1966)	$K_2 = 24,95 (1 + F^{0,5}) u^* / h$ $u^* = \bar{u} \cdot n \sqrt{g} / 1,49 \cdot h^{1,167}$ $F = u^* / \sqrt{gh}$	V.28 V.29 V.30
Langbien e Durum (1967)	$K_2 = 7,6 \cdot \bar{u} \cdot h^{-1,33}$	V.31

TABELA V.2 - Equações Propostas para o Cálculo de  $K_2$ .

onde:

 $D_m$  = coeficiente de difusão molecular ( $L^2T^{-1}$ ), $F$  = número de Froude, $u^*$  = velocidade de fricção ( $LT^{-1}$ ), e $g$  = aceleração da gravidade ( $LT^{-2}$ ).



$\Delta h$  = mudança na elevação da superfície da água (L)

$t_f$  = tempo de viagem (T)

A concentração de saturação de oxigênio dissolvido,  $O^*$ , é calculado à uma pressão padrão (760 mm de Hg), pela equação:

$$O^* = 24,89 - 0,426 T + 0,00373 T^2 - 0,0000133 T^3 \quad (V.33)$$

onde:

$T$  = temperatura da água ( $^{\circ}F$ )

Todas as outras taxas constantes e outros fatores (com exceção da concentração de saturação de oxigênio) dependentes da temperatura, são formulados seguindo a relação abaixo para transformá-los a qualquer temperatura desejada:

$$X_T = X_T^{20} \cdot \theta^{(T-20)} \quad (V.34)$$

onde:

$X_T$  = valor da variável à temperatura local,

$X_T^{20}$  = valor da variável à  $20^{\circ}C$ ,

$T$  = temperatura ( $^{\circ}C$ ), e

$\theta$  = constante empírica para cada variável dependente da temperatura

O modelo utiliza:

$\theta = 1,0159$  para o cálculo de  $K_2$

$\theta = 1,047$  para calcular todos os outros coeficientes.

## V.8. Resultados Obtidos do Modelo

O modelo QUAL-II/SEMCOG além de fornecer, como saída, a impressão dos dados de entrada, ainda fornece:

- Concentração de OD, DBO, Amônia, Nitrato, Fósforo, Algas, Coliformes, material não-conservativo arbitrário e de três materiais conservativos arbitrários.

- Vazão, fluxo incremental, quilometragem e temperatura.

- Imprime ainda um relatório opcional com dados de velocidade, profundidade,  $K_1$ ,  $K_2$ , taxas de decaimento para Amônia, Nitrito, Coliformes e taxas de crescimento e respiração das Algas.

## V.9. Calibração do QUAL-II/SEMCOG Utilizando o Método de Quasilinearização

A rotina de otimização desenvolvida para calibrar os parâmetros das equações solucionadas pelo QUAL-II/SEMCOG, seguindo o algoritmo apresentado na seção IV.2.2.1.2, baseou-se nos trabalhos desenvolvidos por Cárdenas (1974) e por Lee e Hwang (1971).

Assim como nos trabalhos referenciados, toda a rotina baseou-se nas equações de OD e DBO, e foram feitas algumas simplificações, a saber:

Foi considerado somente a parcela  $dC/dt$  da equação V.1; ou seja, somente a taxa de variação do oxigênio dissolvido e da demanda bioquímica de oxigênio. Essa porção refere-se às mudanças individuais ocorridas nos constituintes, independentes de dispersão, advecção, fontes ou retiradas; ou seja, representa as variações devido, somente, a reações físicas, químicas e biológicas, crescimento e decaimento do constituinte etc...

Logo, as equações consideradas foram:

$$\frac{dB}{dt} = -K_1 \cdot B - K_3 \cdot B \quad (V.35)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_2 (D^* - D) + (\alpha_3 \mu - \alpha_4 \rho) A - K_1 \cdot B - K_4 / A_X - \alpha_5 \beta_1 N_1 - \alpha_6 \beta_2 N_2 \quad (V.36)$$

onde:

B - concentração de DBO carbonácea (mg/l).

$K_1$  - coeficiente de desoxigenação (l/dia).

$K_3$  - coeficiente de sedimentação (l/dia).

D - concentração de OD (mg/l).

$D^*$  - concentração de saturação de OD (mg/l).

$K_2$  - coeficiente de reaeração (l/dia).

$\alpha_3$  - taxa de produção de oxigênio por unidade de algas (mgO/mgA).

$\mu$  - taxa local de crescimento de algas (l/dia).

$\alpha_4$  - taxa de oxigênio consumido por unidade de algas (mgO/mgA).

$\rho$  - taxa local de respiração de algas (l/dia).

A - concentração de algas ( $\mu$ g/l).

$K_4$  - taxa de demanda bêmica (mg/dia.m).

$A_X$  - área da seção transversal média ( $m^2$ ).

$\alpha_5$  - taxa de oxigênio consumido por unidade de Amônia oxidada (mgO/mgN).

$\beta_1$  - taxa de oxidação biológica da Amônia (l/dia).

$N_1$  - concentração de Amônia como Nitrogênio (mg/l).

$\alpha_6$  - taxa de oxigênio consumido por unidade de Nitrito oxidado (mgO/mgN).

$\beta_2$  - taxa de oxidação biológica de Nitrito (l/dia).

$N_2$  - concentração de Nitrito como Nitrogênio (mg/l).

Ainda nessas equações não foram considerados os termos referentes à influência das algas (respiração e fotossíntese) e da carga bêntica, por não se dispor dessas medidas.

Mesmo simulando Amônia, Nitrito e Nitrato, não foi possível considerar suas taxas de variação como parâmetros a otimizar, uma vez que não se contava com dados observados de Amônia e Nitrito nos pontos onde foram coletados dados de OD e DBO. Isso não chega a representar um grande problema pois é sabido que a taxa constante com que se processa a nitrificação é muito menor que a da oxidação da matéria carbonácea. (Ramalho, 1977).

Serão estimados, através da Quasilinearização, somente os parâmetros  $K_1$  e  $K_2$ .

Feitas essas simplificações, tem-se as seguintes equações:

$$\frac{dB}{dt} = - (K_1 + K_3) \cdot B \quad (V.35a)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_2 (D^* - D) - K_1 \cdot B \quad (V.36b)$$

Em situações experimentais reais, as taxas constantes  $K_1$  e  $K_2$  não podem ser medidas diretamente; somente B e D podem ser medidos para vários valores de t. Esses parâmetros, então, devem ser estimados a partir dos valores experimentais de OD e DBO.

Uma vez que as equações (V.35a) e (V.35b) podem ser resolvidas de forma conjunta, a estimativa desses parâmetros não é muito difícil. Entretanto deve-se considerar que essas equações são uma representação bem simplificada do sistema real.

Os parâmetros  $K_1$  e  $K_2$ , aparecem de forma não-linear nas soluções analíticas resultantes dessas equações e a estimativa dos parâmetros de equações algébricas não-lineares não é simples. A técnica de Quasilinearização, é nesse caso, muito mais efetiva do que as técnicas de regressão não-linear ou de mínimos quadrados não-lineares, comumente utilizadas.

Para estimar  $K_1$  e  $K_2$ , é conveniente considerar esses parâmetros desconhecidos como variáveis paralelas dependentes de B e D e como funções da variável independentes t. Devido a essas funções não variarem com t, tem-se:

$$\frac{dK_1}{dt} = 0 \quad (V.37)$$

$$\frac{dK_2}{dt} = 0 \quad (V.38)$$

Uma vez que o algoritmo do método já foi extensivamente abordado no Capítulo IV, seguindo a metodologia, a primeira fase será assumir um conjunto de funções iniciais para  $B(t)$ ,

$D(t)$ ,  $K_1(t)$  e  $K_2(t)$ , para um passo inicial  $n=0$ , o que representa o "chute inicial".

A segunda fase consiste em integrar as equações particulares, numericamente, utilizando as condições iniciais, para um tempo  $t=0$ .

As equações particulares são obtidas através da linearização das equações (V.35.a) a (V.38), aplicando o Método de Newton Raphson da seguinte forma:

$$\frac{dX_{n+1}}{dt} = f(X_n) + J(X_n) (X_{n+1} - X_n) \quad (V.39)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{dB_{n+1}}{dt} \\ \frac{dD_{n+1}}{dt} \\ \frac{dK_{1,n+1}}{dt} \\ \frac{dK_{2,n+1}}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(K_{1,n} + K_3)B_n \\ K_{2,n}(D^* - D_n) - K_{1,n}B_n \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -(K_{1,n} + K_3) & 0 & -B_n & 0 \\ -K_{1,n} & -K_{2,n} & -B_n & (D^* - D_n) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} B_{n+1} - B_n \\ D_{n+1} - D_n \\ K_{1,n+1} - K_{1,n} \\ K_{2,n+1} - K_{2,n} \end{bmatrix} \quad (V.40)$$

Logo, tem-se para as equações particulares:

$$\frac{dB_{n+1}}{dt} = -(K_{1,n} + K_3) \cdot B_{n+1} - B_n \cdot K_{1,n+1} + B_n \cdot K_{1,n} \quad (V.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{dD_{n+1}}{dt} = & -K_{1,n} \cdot B_{n+1} - K_{2,n} \cdot D_{n+1} - B_n \cdot K_{1,n+1} + \\ & + (D^* - D_n) \cdot K_{2,n+1} + B_n \cdot K_{1,n} + D_n \cdot K_{2,n} \end{aligned} \quad (V.42)$$

$$\frac{dK_{1,n+1}}{dt} = 0 \quad (V.43)$$

$$\frac{dK_{2,n+1}}{dt} = 0 \quad (V.44)$$

Sujeitas às condições iniciais ( $t = 0$ ):

$$B_{n+1}(0) = B_0 \quad (V.45)$$

$$D_{n+1}(0) = D_0 \quad (V.46)$$

$$K_{1,n+1}(0) = 0 \quad (V.47)$$

$$K_{2,n+1}(0) = 0 \quad (V.48)$$

A terceira etapa consiste em integrar numericamente as equações homogêneas, utilizando as condições iniciais respectivas, para  $t = 0$ .

As equações homogêneas são integradas duas vezes, pois como já foi discutido, a idéia geral é encontrar um conjunto de soluções particulares e  $j$  conjuntos de soluções homogêneas, onde  $j$  é o número de condições iniciais ou parâmetros desconhecidos.

As equações homogêneas são obtidas através da linearização das mesmas equações, aplicando Newton-Raphson da seguinte forma:

$$\frac{dx_{n+1}}{dt} = J(X_n)(X_{n+1}) \quad (V.49)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{dB_{n+1}}{dt} \\ \frac{dD_{n+1}}{dt} \\ \frac{dK_{1,n+1}}{dt} \\ \frac{dK_{2,n+1}}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(K_{1,n} + K_3) & 0 & -B_n & 0 \\ -K_{1,n} & -K_{2,n} & -B_n & (D^* - D_n) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} B_{n+1} \\ D_{n+1} \\ K_{1,n+1} \\ K_{2,n+1} \end{bmatrix} \quad (V.50)$$

$$\frac{dB_{n+1}}{dt} = -(K_{1,n} + K_3) \cdot B_{n+1} - B_n \cdot K_{1,n+1} \quad (V.51)$$

$$\frac{dD_{n+1}}{dt} = -K_{1,n} \cdot B_{n+1} - K_{2,n} \cdot D_{n+1} - B_n \cdot K_{1,n+1} + (D^* - D_n) \cdot K_{2,n+1} \quad (V.52)$$

$$\frac{dK_{1,n+1}}{dt} = 0 \quad (V.53)$$

$$\frac{dK_{2,n+1}}{dt} = 0 \quad (V.54)$$

Sujeitas ã seguintes condições iniciais ( $t = 0$ ):

$$\text{para } j = 1 \quad B_{1,n+1}(0) = 0 \quad (V.55)$$

$$D_{1,n+1}(0) = 0 \quad (V.56)$$

$$K_{11,n+1}(0) = 1 \quad (V.57)$$

$$K_{21,n+1}(0) = 0 \quad (V.58)$$

$$\text{para } j = 2 \quad B_{2,n+1}(0) = 0 \quad (V.59)$$

$$D_{2,n+1}(0) = 0 \quad (V.60)$$

$$K_{12,n+1}(0) = 0 \quad (V.61)$$

$$K_{22,n+1}(0) = 1 \quad (V.62)$$



Teremos para a solução geral do sistema, uma combinação linear das soluções particulares e homogêneas, arranjadas da seguinte maneira:

$$B_{n+1}(t) = B_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot B_{hj,n+1}(t) \quad (V.63)$$

$$D_{n+1}(t) = D_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot D_{hj,n+1}(t) \quad (V.64)$$

$$K_{1,n+1}(t) = K_{1p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot K_{1hj,n+1}(t) \quad (V.65)$$

$$K_{2,n+1}(t) = K_{2p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot K_{2hj,n+1}(t) \quad (V.66)$$

De posse das soluções das equações particulares e das homogêneas, obtidas nas etapas anteriores, para vários valores de  $t$ , os valores ainda desconhecidos são as duas constantes de integração  $a_{1,n+1}$  e  $a_{2,n+1}$ . Utilizando o método dos mínimos quadrados, o problema agora é encontrar os valores dessas constantes, tais que minimizem a diferença entre os valores calculados e observados de OD e DBO.

$$Q = \sum_{t=1}^n \left[ B_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot B_{hj,n+1}(t) - b \right]^2 + \sum_{t=1}^n \left[ D_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot D_{hj,n+1}(t) - d \right]^2 \quad (V.67)$$

onde  $b$  e  $d$  são os valores observados.

Derivando a equação (V.67) em relação às duas constantes, e igualando-se a zero, terá origem um sistema linear que poderá ser facilmente solucionado, fornecendo finalmente o valor

de  $a_{1,n+1}$  e  $a_{2,n+1}$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial a_{i,n+1}} = & 2 \cdot \sum_{t=1}^n B_{hi,n+1}(t) \left[ B_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot B_{hj,n+1}(t) - b \right] + \\ & + 2 \cdot \sum_{t=1}^n D_{hi,n+1}(t) \left[ D_{p,n+1}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{j,n+1} \cdot D_{hj,n+1}(t) - d \right] \end{aligned} \quad (V.68)$$

A próxima etapa será calcular as equações (V.63) a (V.66) utilizando os valores de  $a_{1,n+1}$  e  $a_{2,n+1}$  obtidos. Compara-se então  $B_{n+1}(t)$ ,  $D_{n+1}(t)$ ,  $K_{1,n+1}(t)$  e  $K_{2,n+1}(t)$  com os valores do passo anterior. Caso essa diferença não obedeça a uma tolerância pré-estabelecida, volta-se a segunda etapa e o processo é repetido até que seja obedecida essa tolerância.

## CAPÍTULO VI

## VI. APLICAÇÃO DO MÉTODO DE QUASILINEARIZAÇÃO A UMA SITUAÇÃO HIPOTÉTICA

Para testar a efetividade do método em discussão, foi feita aplicação a uma situação hipotética, apresentada como exemplo no trabalho de Lee e Hwang (1971), na tentativa de calibrar os parâmetros  $K_1$  e  $K_2$ , estimados a partir de um conjunto de dados observados.

Foi considerado o seguinte modelo:

$$\frac{dB}{dt} = - (K_1 + K_3) \cdot B + R \quad (\text{VI.1})$$

$$\frac{dD}{dt} = K_1 \cdot B - K_2 \cdot D - A \quad (\text{VI.2})$$

onde:

R - adição de DBO resultante do "run-off", e

A - taxa de produção ou redução de oxigênio devido à fotossíntese ou respiração das plantas

Esses dados observados foram obtidos numericamente, solucionando as equações acima, com os seguintes valores:

$$B_0 = 7,0 \quad D_0 = 5,7 \quad (\text{VI.3})$$

$$K_1 = 0,31 \quad K_2 = 1,02 \quad K_3 = 0,03 \quad (\text{VI.4})$$

$$R = 0,15 \quad A = 0,85 \quad t_f = 1 \quad (\text{VI.5})$$

As equações (VI.1) e (VI.2) foram integradas numericamente, fazendo uso do esquema de Runge-Kutta, com passo de integração,  $\Delta t = 0,01$ . Essa integração forneceu 100 valores de OD e DBO considerados como dados experimentais. De posse, então, dos valores "observados" (na realidade, gerados), partiu-se para a aplicação da metodologia já discutida.

As condições iniciais consideradas para obter um conjunto de soluções particulares e dois conjuntos de soluções homogêneas, foram:

$$\begin{aligned} B_{p,n+1}(0) &= B_0 = 7,0 \\ D_{p,n+1}(0) &= D_0 = 5,7 \\ K_{1p,n+1}(0) &= 0 \\ K_{2p,n+1}(0) &= 0 \end{aligned} \quad (VI.6)$$

$$\begin{aligned} B_{h1,n+1}(0) &= 0 & B_{h2,n+1}(0) &= 0 \\ D_{h1,n+1}(0) &= 0 & D_{h2,n+1}(0) &= 0 \\ K_{1h1,n+1}(0) &= 1 & K_{1h2,n+1}(0) &= 0 \\ K_{2h1,n+1}(0) &= 0 & K_{2h2,n+1}(0) &= 1 \end{aligned} \quad (VI.7)$$

Para o passo inicial, com  $0 \leq t \leq t_f$ ,  $t_f = 1$ , foram adotados os valores:

$$\begin{aligned} B_{n=0}(t) &= 7,0 \\ D_{n=0}(t) &= 5,7 \\ K_{1,n=0}(t) &= 0,1 \\ K_{2,n=0}(t) &= 0,1 \end{aligned} \quad (VI.8)$$

Embora, os valores iniciais assumidos para  $K_1$  e  $K_2$ , tenham sido muito diferentes dos reais, o método provou sua rápida convergência, alcançando os valores "reais",  $K_1 = 0,31$  e  $K_2 = 1,02$ , em apenas 5 iterações. As taxas de convergência de B e D, obtidas com os valores assumidos inicialmente para  $K_1$  e  $K_2$ , são mostradas na Figura VI.1. Pode-se notar aí, a grande melhoria entre os valores anteriormente assumidos como funções constantes e os resultados da primeira iteração. As taxas de convergência, obtidas com a segunda e a terceira iterações, são aproximadamente iguais às mostradas nessa figura.

Tanto os dados experimentais quanto as soluções reais de B e D, devem ser utilizados para as condições iniciais assumidas, objetivando aumentar a taxa de convergência, em situações práticas.

Para a aplicação do algoritmo do método de Quasilinearização ao exemplo apresentado, foi feito um programa computacional, em linguagem FORTRAN, sendo também utilizadas algumas rotinas já implantadas no NCE da UFRJ.

Os sistemas de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, do tipo  $y' = f(x, y)$ , com condições iniciais e resultantes da linearização prévia do modelo pelo método de Newton-Raphson, foram integradas através da rotina DVERK, do diretório UFRJ. Essa rotina soluciona esses sistemas pelo método de Runge-Kutta de 5ª e 6ª ordem.

Para calcular os parâmetros desconhecidos (constantes de integração), que minimizassem a diferença entre valores

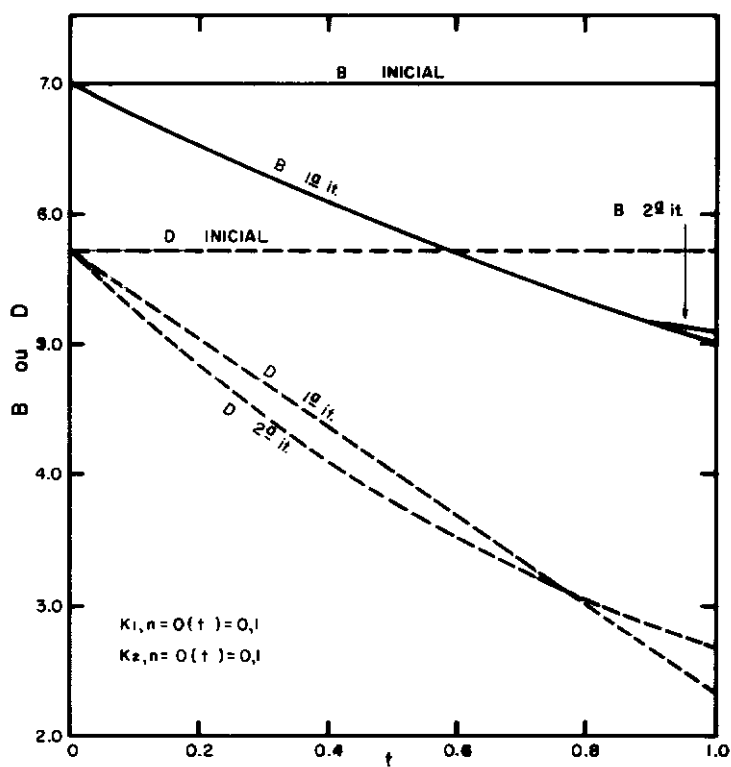
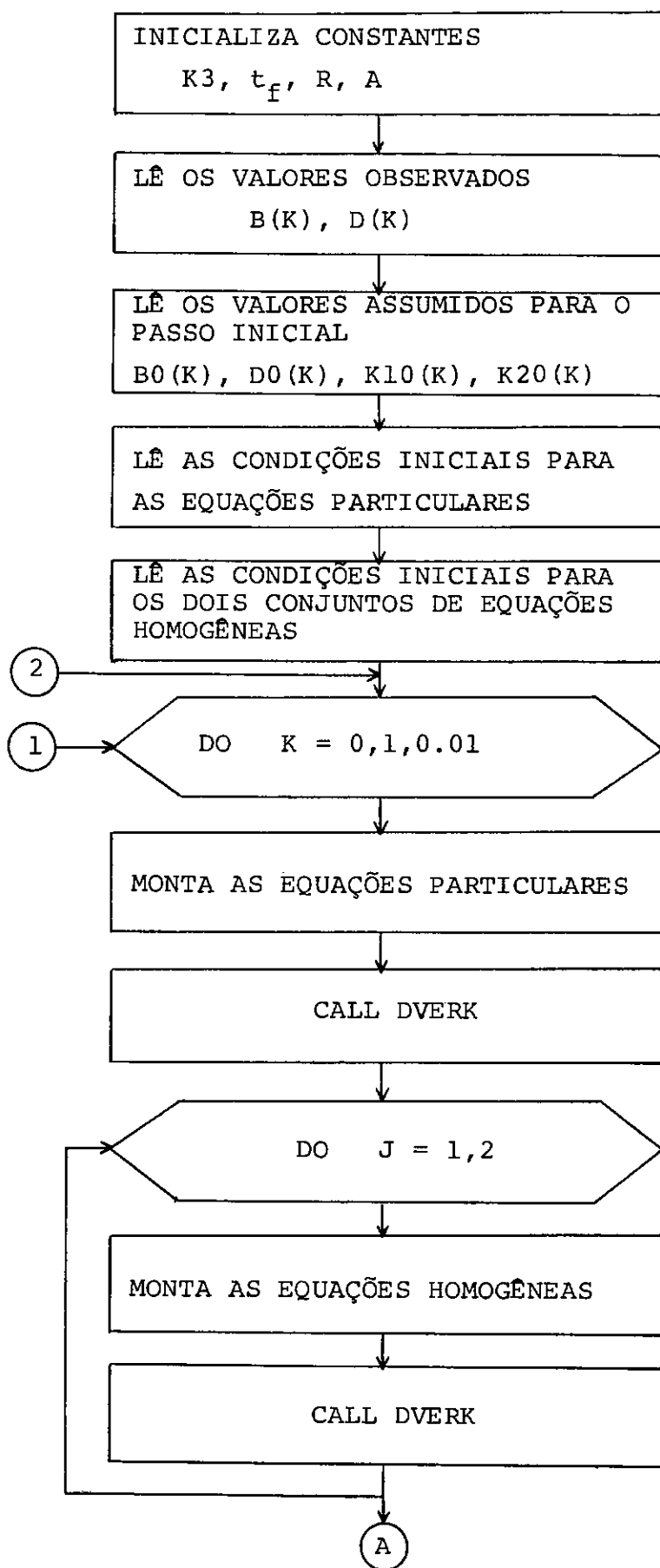


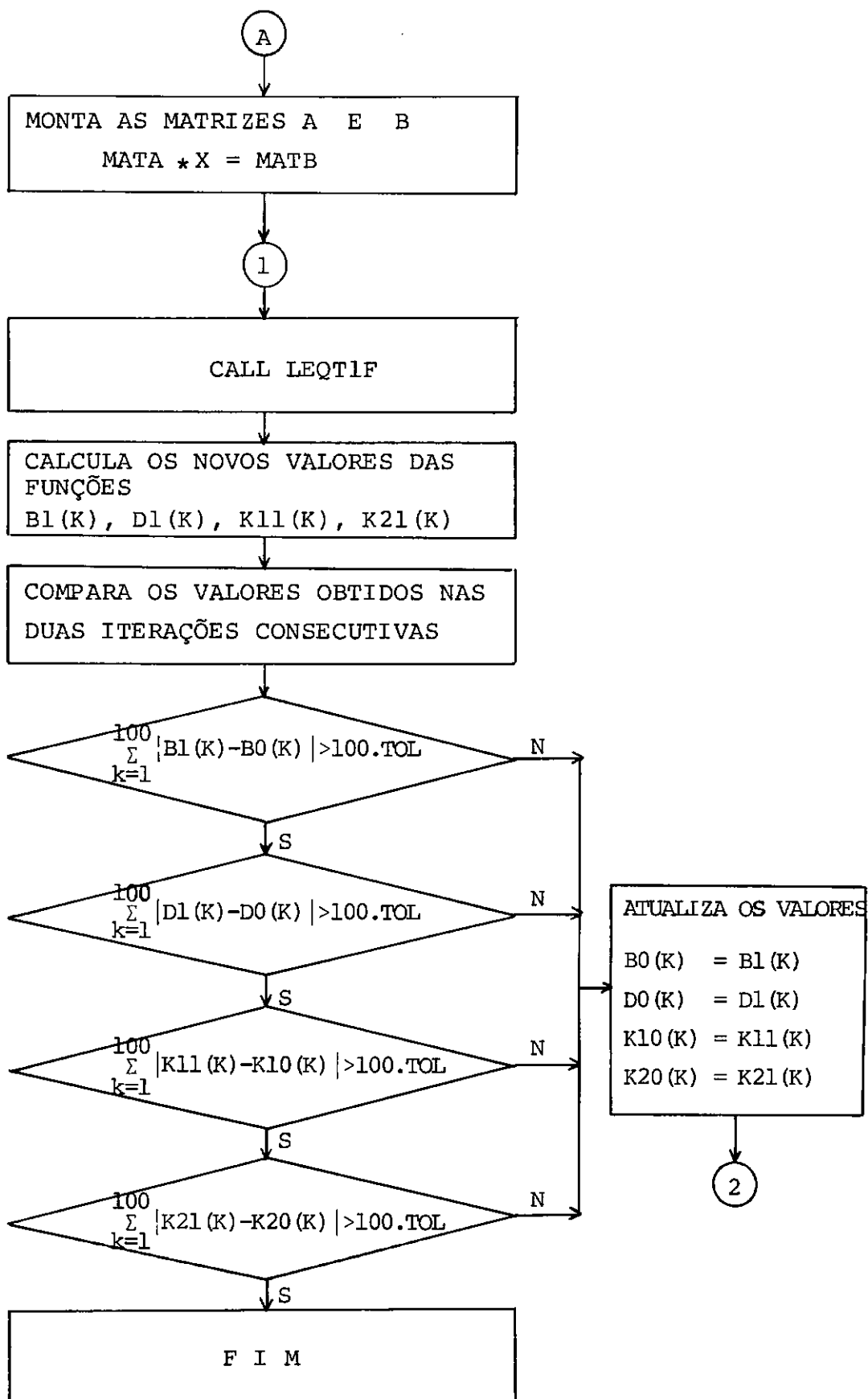
FIGURA VI.1 - TAXAS DE CONVERGÊNCIA DE  $B$  E  $D$

calculados e observados, inseridos num sistema de equações algébricas do tipo  $AX = B$ , foi utilizada a rotina LEQT1F, também já implantada no NCE. Na resolução do sistema formado, a rotina LEQT1F adota o Método de Eliminação de Gauss.

O fluxograma a seguir apresentado, contribui para a melhor visualização dos detalhes e da estrutura do programa elaborado.







## CAPÍTULO VII

## VII. APLICAÇÃO DO MÉTODO A UMA SITUAÇÃO REAL

## VII.1. Aplicação do Modelo QUAL-II/SEMCOG

## VII.1.1. Descrição da Bacia do Rio Atibaia

O rio utilizado no presente estudo, o Atibaia, foi selecionado devido à sua grande importância de âmbito regional, e por estar localizado numa área de crescente concentração populacional e industrial.

Os dados relativos ao referido rio, foram obtidos junto à CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental) por intermédio da Superintendência de Estudos Ambientais (CETESB, 1981).

O Rio Atibaia é um dos formadores do Piracicaba, afluente do Médio Tietê Superior; insere-se, portanto, na área de cabeceiras da bacia do Rio Paranã, um dos três sistemas hidrográficos mais importantes do Estado de São Paulo. Nasce da confluência dos rios Cachoeira e Atibainha.

Com um comprimento de aproximadamente, 180 Km, o rio principal sofre um desnível altimétrico de 450 m. A área total da bacia abrange 2.742 Km<sup>2</sup>, representando 1,10% da área total do Estado, que é de 248.000 Km<sup>2</sup> (Figura VII.4).

Apesar da sua densidade, trata-se de um sistema relativamente pobre, em termos de vazão, exatamente por se tratar de zona de cabeceiras com contribuintes curtos e de acentuada declividade. Acresce-se, também, que o solo local tem escasso potencial de armazenamento de água; de um modo geral é pouco profundo, passando rapidamente à rocha matriz, que aflora com grande frequência.

A cobertura vegetal, originalmente constituída de matas tropicais, cedeu lugar ao café, que a cinco décadas, veio sendo substituído por pastagens geralmente naturais e pobres. A tênue vegetação, portanto, pouco contribui para reter a água no solo das íngremes vertentes.

Dessa forma, é de se supor uma quase perfeita aderência do regime fluvial ao do pluviométrico da bacia, marcados por um caráter tropical de altitude. Apesar da pequena extensão da bacia, é possível sentir diferenças, quanto à climatização entre os seus trechos superior, médio e inferior.

Do ponto de vista climático, a bacia do Atibaia, apresenta, no trecho superior, um clima temperado, brando, chuvoso com verão fresco; e nos trechos médio e inferior, um clima temperado, brando, com inverno seco e verão quente.

Quanto à temperatura, os dados referentes ao posto pluviométrico de Atibaia, demonstram pequenas variações nos valores médios de inverno ou de verão; fevereiro apresenta-se como o mês mais quente, com média de  $24^{\circ}\text{C}$ , opondo-se ao mês mais frio, que é julho, com  $16,3^{\circ}\text{C}$ ; resultando uma amplitude térmica anual

de  $7,7^{\circ}\text{C}$ .

Durante o período de amostragem (agosto/77 a julho/78) observa-se que, pelo menos, em seis meses, a média mensal de temperatura esteve acima de  $20^{\circ}\text{C}$ , atingindo um valor máximo de  $25,1^{\circ}\text{C}$  (Nova Odessa) e um mínimo de  $15^{\circ}\text{C}$  (Atibaia).

No que concerne a precipitações pluviométricas, observa-se que os meses de dezembro, janeiro e fevereiro são os mais chuvosos e os de junho, julho e agosto os mais secos. Por outro lado, verifica-se que o período de estiagem, crítico quanto à qualidade da água, compreende os meses de abril a setembro, e o período de cheias se estende de outubro a março.

O posto de Campinas acusou a maior variação dos índices pluviométricos no período de amostragem, com um valor máximo de 286,3 mm (dezembro/77) e um mínimo de 8,6 mm (abril/78).

A localização das seções batimétricas e dos postos pluviométricos encontra-se na Figura VII.1.

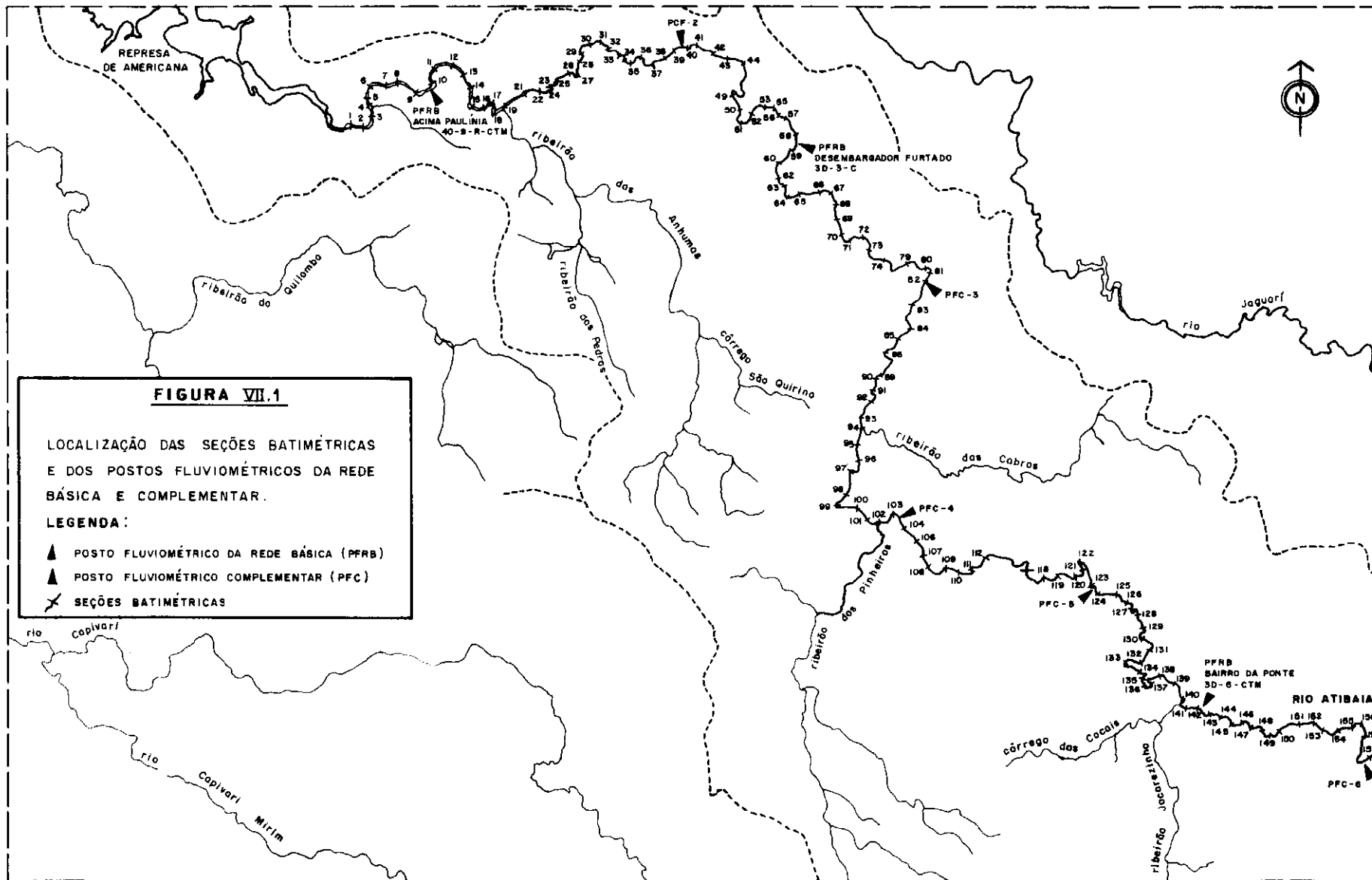
Um ponto importante no estudo de poluição de corpos d'água, é a localização de despejos industriais e municipais, que representam, na maioria dos casos, altas cargas localizadas de DBO. Na bacia do Atibaia a densidade industrial cresce de montante para jusante, devido ao fato dos grandes centros consumidores estarem situados do seu ponto médio até a foz, sendo a área de maior concentração próxima ao município de Paulínia, onde se localiza o polo-petroquímico. Observa-se nessa bacia que, nas regiões do Médio e Alto Atibaia, predomina a economia primária,

**FIGURA VII.1**

LOCALIZAÇÃO DAS SEÇÕES BATIMÉTRICAS  
E DOS POSTOS FLUVIOMÉTRICOS DA REDE  
BÁSICA E COMPLEMENTAR.

**LEGENDA:**

- ▲ POSTO FLUVIOMÉTRICO DA REDE BÁSICA (PFRB)
- ▲ POSTO FLUVIOMÉTRICO COMPLEMENTAR (PFC)
- ✕ SEÇÕES BATIMÉTRICAS



pequenas cidades, enquanto que na região do Baixo Atibaia, a industrialização já é bastante desenvolvida, bem como a urbanização.

As Figuras VII.2 e VII.3 apresentam a localização e tipo dos despejos verificados ao longo do rio. Essas cargas chegam ao Atibaia através de lançamentos diretos, como é o caso dos esgotos urbanos de Atibaia e Paulínia e das indústrias Rhodia, Replan e Dupont, ou também, trazidos por afluentes, a exemplo do Ribeirão Jacarezinho, que arrasta consigo efluentes de várias indústrias e do município de Itatiba.

A principal atividade industrial na bacia é a indústria química, caracterizada por 14 indústrias responsáveis pela maior parte da poluição no rio. Encontram-se ainda indústrias alimentícias, têxteis, de papel, metalúrgicas, etc...

#### VII.1.2. Dados Utilizados

A avaliação da qualidade das águas e a influência da poluição no perfil de Oxigênio Dissolvido do Rio Atibaia, implicou na seleção de dados hidráulicos e de qualidade de água, obtidos junto à CETESB (seção VII.1.1), necessários à simulação do modelo QUAL-II/SEMCOG.

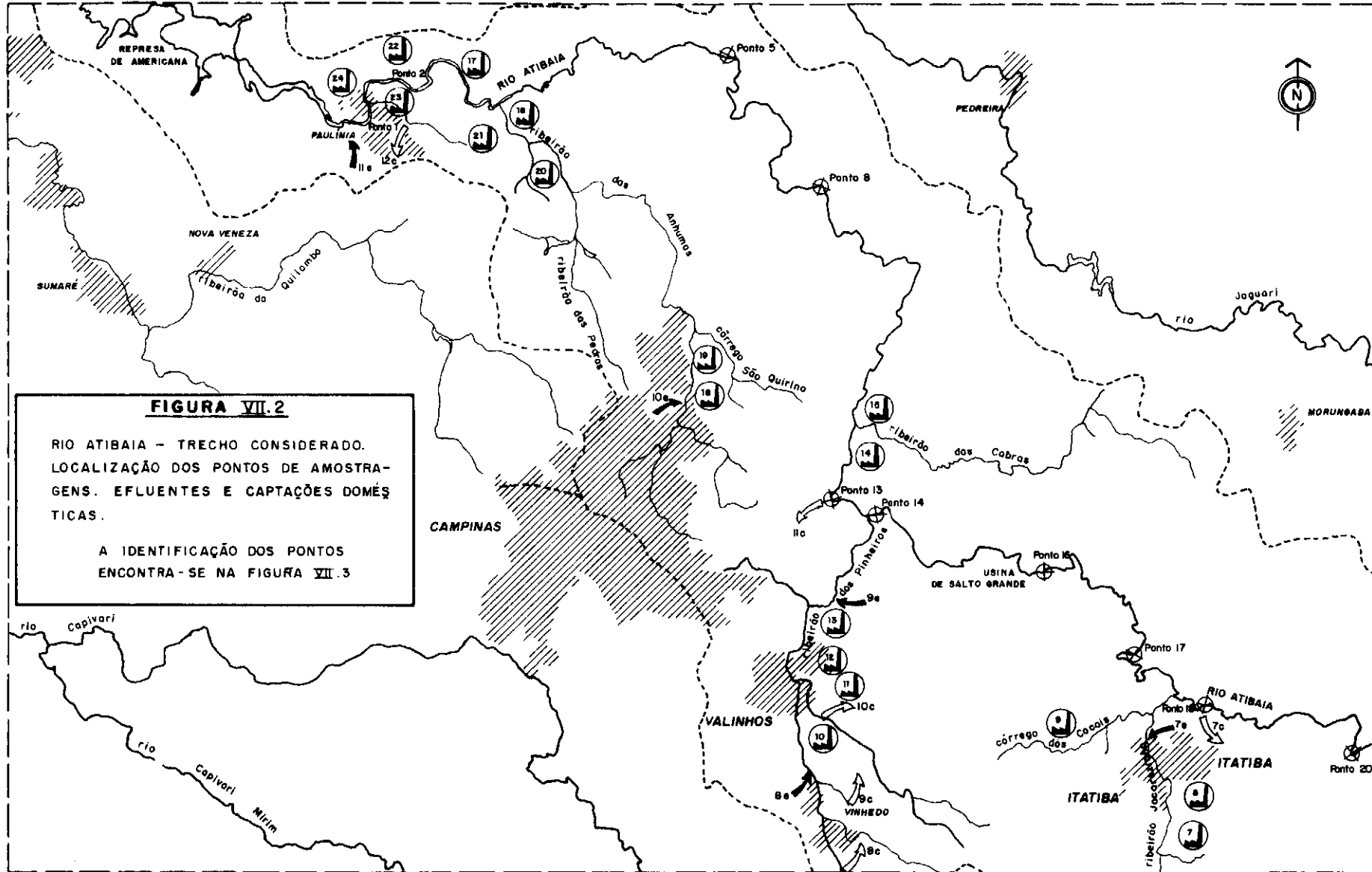
A divisão dos trechos para a simulação foi efetuada, levando-se em consideração tais fatores principais:

- Os trechos já divididos, anteriormente, pela CETESB,

**FIGURA VII.2**

RIO ATIBAIA - TRECHO CONSIDERADO.  
LOCALIZAÇÃO DOS PONTOS DE AMOSTRA-  
GENS. EFLUENTES E CAPTAÇÕES DOMÉ-  
STICAS.

A IDENTIFICAÇÃO DOS PONTOS  
ENCONTRA-SE NA FIGURA VII.3



# CAPTAÇÕES ↗ :

7c - ITATIBA  
8c - VINHEDO  
9c - VINHEDO  
10c - VALINHOS  
11c - CAMPINAS  
12c - PAULÍNIA

# EFLUENTES URBANOS ↘ :

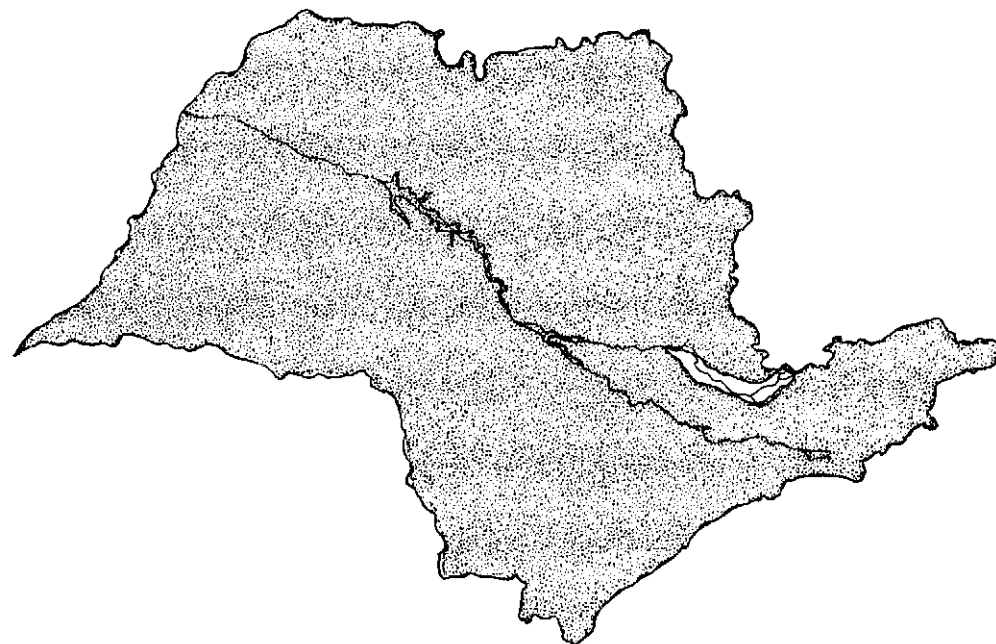
7e - ITATIBA  
8e - VINHEDO  
9e - VALINHOS  
10e - CAMPINAS  
11e - PAULÍNIA

# INDÚSTRIAS 🏭 :

7 - TIMAYO DO BRASIL S/A	16 - LIQUID CARBONIC S/A
8 - S/A FABRIL SCAVONE	17 - RHODIA IND. QUÍMICAS S/A
9 - GRANJAS MARA S/A	18 - IND. CAMPINEIRA DE SABÃO
10 - FRIGORÍFICO MARTINI S/A	19 - IND. ANDRADE S/A
11 - FIGOLÂNDIA S/A	20 - ENGENHO BOA ESPERANÇA
12 - CARTONIFÍCIO VALINHOS S/A	21 - RHODÍACO IND. QUÍMICAS LTDA
13 - IND. GESSY LEVER LTDA	22 - PETRÓLEO BRASILEIRO S/A - REPLAN
14 - NITOW PAPEL S/A	23 - DUPONT DO BRASIL S/A
15 - MERCK SHARP	24 - J. BRESSLER S/A

IDENTIFICAÇÃO DOS PONTOS DE EFLUENTES URBANOS, INDUSTRIAIS E CAPTAÇÕES.

**FIGURA VII.3**



ESCALA : 1 : 100.000

LOCALIZAÇÃO DA BACIA DO RIO ATIBAIA NO ESTADO DE SÃO PAULO.

**FIGURA VII.4**



- os dados disponíveis para os mesmos, e
- os requisitos necessários ao modelo utilizado.

Essa divisão seguiu também alguns critérios convencionais; ou seja, levou-se em conta os pontos significativos de lançamentos, afluentes, características físicas (variações da velocidade e profundidade, resultando 16 trechos a jusante do reservatório de Bragantina.

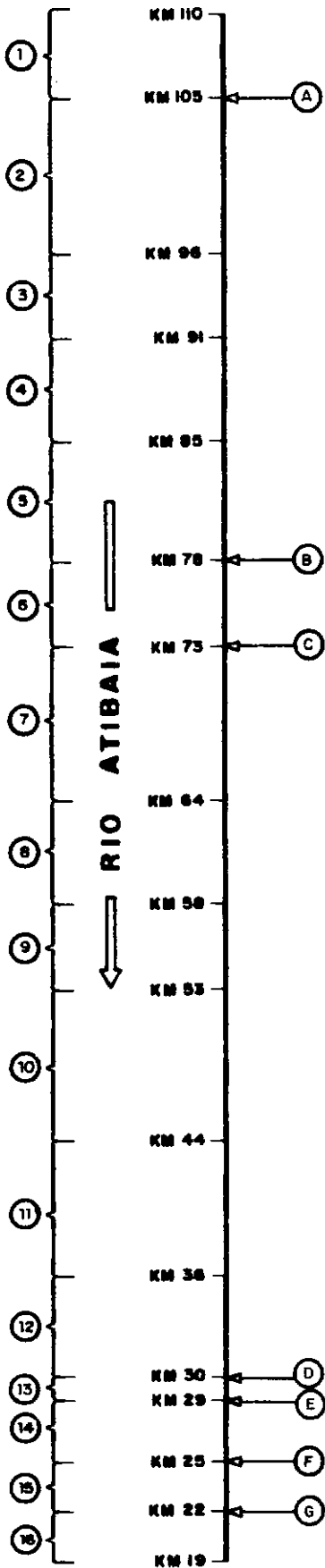
Foi escolhido, para a aplicação, o trecho compreendido entre o Km 110 e o Km 19, perfazendo um total de 91 Km. Foram abandonados os trechos Atibaia - Ribeirão Onofre e Ribeirão Onofre - Km 153, estudados pela CETESB, devido à descontinuidade existente até o Km 110 ocasionada pela barragem de Bragantina.

As cargas distribuídas nos ribeirões existentes, por falta de informações precisas, foram agrupadas numa só carga pontual, no ponto de desembocadura desses ribeirões.

Foram feitos alguns ajustes, para que fosse obedecido o comprimento de 1 Km para cada elemento computacional, e algumas cargas foram deslocadas de modo a pertencerem a determinados trechos.

A divisão dos trechos e as cargas consideradas estão apresentadas na Figura VII.5.

Os parâmetros de qualidade de água analisados, para quantificar e qualificar a poluição orgânica do rio foram: OD,  $\text{DBO}_5$ , Amônia, Nitrito, Nitrato, Fósforo e Coliformes Fecais.



### CARGAS :

- (A) - RIBEIRÃO JACAREZINHO
- (B) - RIBEIRÃO PINHEIROS
- (C) - RIBEIRÃO DAS CABRAS
- (D) - RHODIA
- (E) - RIBEIRÃO ANHUMAS
- (F) - REPLAN
- (G) - DUPONT

**FIGURA VII.5**

**TRECHOS E CARGAS CONSIDERADOS  
PARA O RIO ATIBAIA.**

Além desses dados básicos obtidos nos pontos de coletas do rio e nos despejos, também fez-se necessário o conhecimento das relações entre vazões, velocidades e profundidades nas principais seções características do trecho em estudo. Os coeficientes e expoentes para o cálculo das velocidades e profundidades foram retirados das curvas chaves,  $h \times Q$ , para alguns trechos. As velocidades foram obtidas da relação  $v = (Q_1 + Q_2) / (A_1 + A_2)$ , uma vez que as áreas eram dados disponíveis.

Uma vez obtidos  $v \times Q$  e  $h \times Q$ , foi utilizado um programa de Regressão Múltipla (BMD02R), de onde foram extraídas as constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$ , das relações  $v = a \cdot Q^b$  e  $h = c \cdot Q^d$ , dados de entrada do programa. O coeficiente de Manning foi tomado igual a 0,03 em todos os trechos.

A aplicação foi feita considerando estado permanente e não optando pelo aumento de fluxo quando a concentração de OD se encontrasse abaixo de 4mg/l.

Os dados de vazão foram obtidos do inventário da CETESB e o fluxo incremental foi calculado subtraindo-se a vazão de montante da de jusante, de cada trecho; assegurando a continuidade e considerando os despejos. As captações foram desconsideradas.

Para os dados incrementais, foram considerados, para todos os trechos, e por sugestão do modelo, condições ótimas, quais sejam:  $OD = 9,2 \text{ mg/l}$ ,  $DBO = 0,0 \text{ mg/l}$  e  $T = 20^\circ\text{C}$ .

As concentrações de Amônia, Nitrito, Nitrato, Fósforo e Coliformes Fecais foram retiradas do relatório do Atibaia, e algumas constantes, como por exemplo a taxa de oxidação biológica da Amônia,  $\beta_1$ , não sendo medidas, foram tomadas iguais às sugeridas pelo manual do QUAL-II/SEMCOG.

As vazões dos despejos, por não serem disponíveis, foram tomadas iguais, a no máximo, a vazão incremental entre trechos; e suas cargas de DBO, em Kg/dia, foram transformadas para mg/l, considerando-se a relação:

$$DBO(mg/l) = 11,574 \times 10^{-3} \times \frac{DBO(kg/dia)}{Q(m^3/s)} \quad (VII.1)$$

onde:  $Q < Q_{inc}$

### VII.1.3. Análise de Sensibilidade

Anteriormente à etapa da calibração do Modelo QUAL-II/SEMCOG, foi feito um estudo que teve por objetivo verificar a sensibilidade do programa face a variações inseridas nos parâmetros e as possíveis simplificações que poderiam ser utilizadas, antes da calibração automática do modelo.

Os testes iniciais utilizaram os dados da campanha de agosto/77 e tiveram como principal interesse, o comportamento do modelo em relação à variação da reaeração em função das várias opções de cálculo do coeficiente  $K_2$  (equações V.24 a V.31).

O programa possui seis alternativas de cálculo para o coeficiente de reaeração,  $K_2$ , (Cap. V). Os cálculos de  $K_2$  e as

consequências na curva OD foram avaliados através de listagens comparativas com as mesmas situações de ocorrência, mas com diferentes opções de cálculo. Verifica-se através dos perfis de OD calculados que a escolha de uma ou outra equação pode ocasionar grandes diferenças nos resultados de OD.

A tendência encontrada em diversas análises, é que os resultados obtidos com as diferentes formas de cálculo, seguem a ordem:

$$K_2(3) > K_2(4) > K_2(6) > K_2(2) > K_2(5)$$

onde:

- (3) - O'Connor e Dobbins;
- (4) - Owens, Edwards e Gibbs;
- (6) - Langbien e Durum;
- (2) - Churchill, Elmore e Buckingham e
- (5) - Tackston e Krenkel.

A Figura VII.6 ilustra os vários perfis de OD, calculados com as diferentes opções para  $K_2$ , e os pontos observados. O valor do coeficiente calculado influi diretamente no perfil de OD, porém é pouco influente no perfil de DBO.

Além da análise de sensibilidade, foi feita uma calibração prévia do modelo, por tentativas. Utilizando a opção do programa de ler o valor de  $K_2$ , partindo-se dos valores de  $K_1$  e  $K_2$  fornecidos pela CETESB para todos os trechos e dos valores observados de OD e DBO, foram feitas variações nesses parâmetros, de modo a oferecerem melhor ajuste da curva calculada aos pontos observados. Foi considerado ainda, um coeficiente de sedimenta-

ção,  $K_3$ .

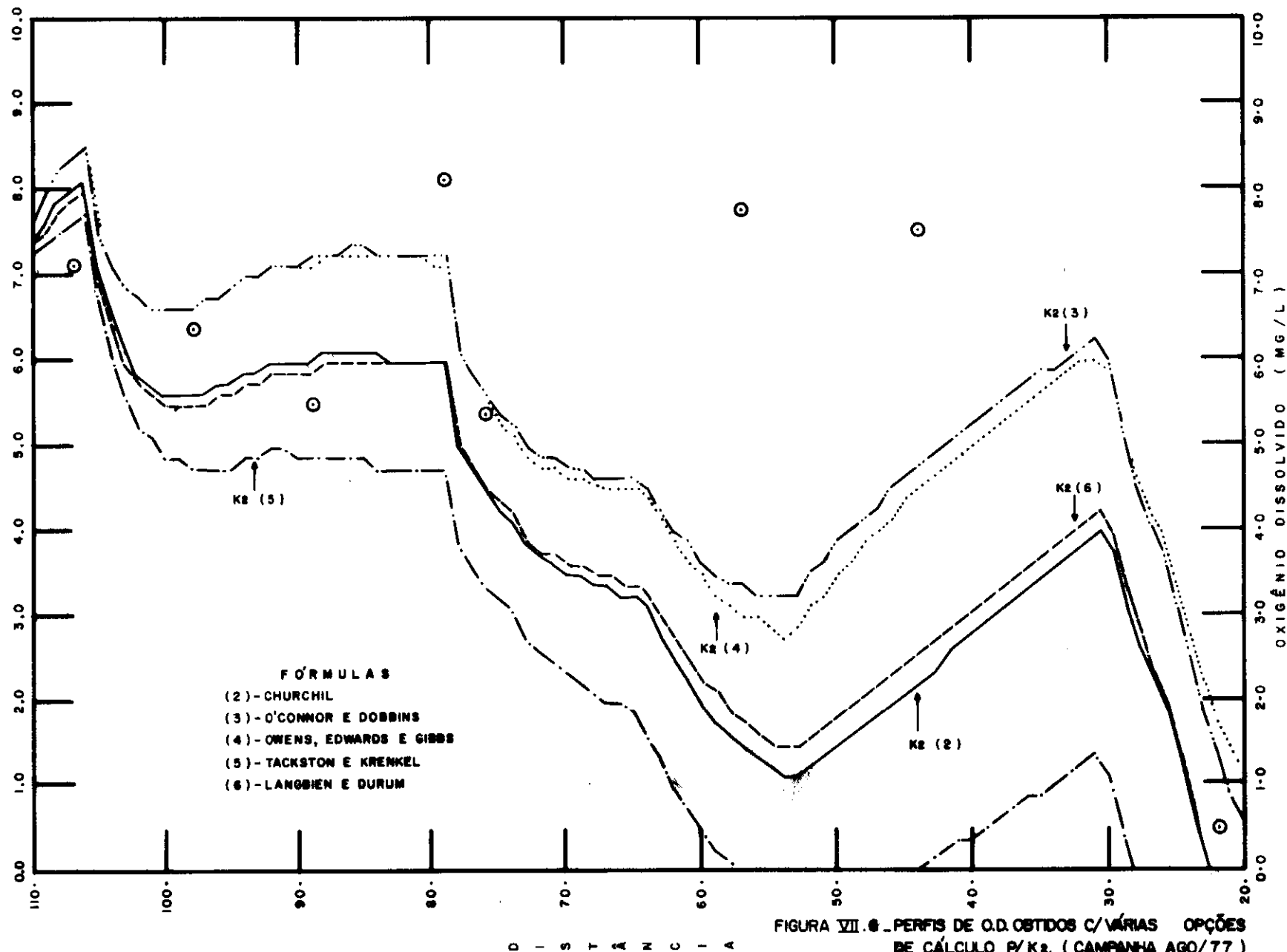
Para efeito da calibração automática subsequente, trechos com características hidráulicas semelhantes foram aglutinados, assumindo iguais parâmetros e os dezesseis trechos originais ficaram reduzidos a oito trechos. Uma outra razão para essa redução, foi a disponibilidade de poucos pontos observados de OD e DBO; apenas oito pontos em toda a extensão analisada do rio.

A Figura VII.7 compara a curva de OD calculada através dos parâmetros originais, a curva ajustada por tentativas fazendo variar os parâmetros, e os dados observados.

A tabela seguinte mostra os valores dos parâmetros tomados para o cálculo dos perfis da Figura VII.7.

TRECHOS	VALORES ORIGINAIS (CETESB)			TRECHOS	VALORES ASSUMIDOS		
	$K_1$	$K_2$	$K_3$		$K_1$	$K_2$	$K_3$
1	0,65	0,47	0,00	1	0,69	0,50	0,10
2	0,69	1,15	0,00	2	0,69	1,00	0,05
3	0,69	1,15	0,00				
4	0,69	0,40	0,00	3	0,69	0,30	0,05
5	0,70	4,20	0,00	4	0,70	3,70	0,05
6	0,70	0,86	0,00	5	0,70	0,70	0,00
7	0,70	1,28	0,00				
8	0,70	3,50	0,00	6	0,70	4,20	0,05
9	0,70	3,50	0,00				
10	0,71	3,55	0,00				
11	0,72	0,82	0,00	7	0,72	0,66	0,00
12	0,72	0,82	0,00				
13	0,72	0,45	0,00	8	0,72	1,65	0,00
14	0,72	1,43	0,00				
15	0,72	1,58	0,00				
16	0,76	2,38	0,00				

TABELA VII.1 - Valores dos Parâmetros Utilizados nos Perfis da Figura VII.7 (Campanha de Agosto/77).



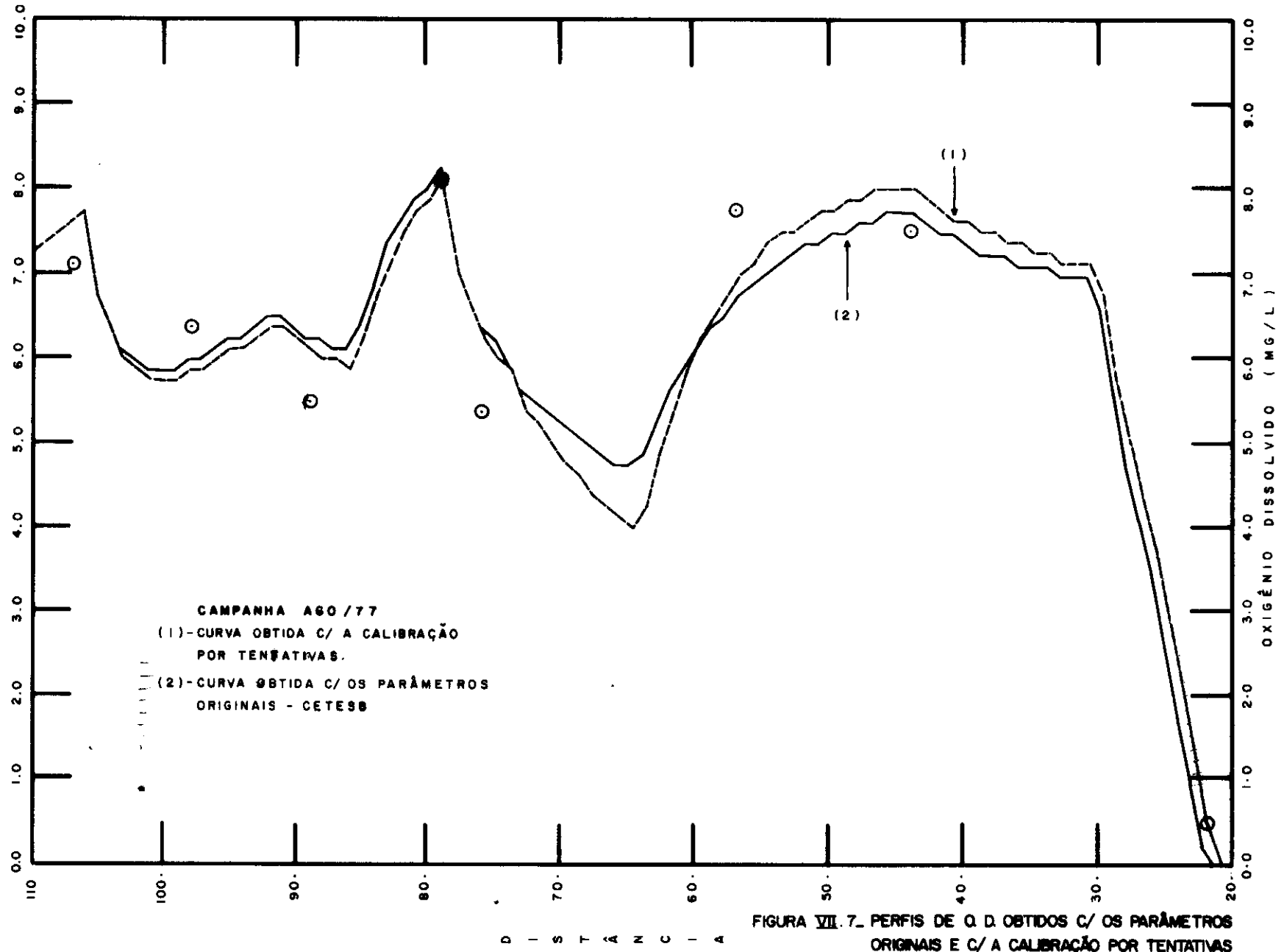


FIGURA VII. 7. PERFS DE O. D. OBTIDOS C/ OS PARÂMETROS ORIGINAIS E C/ A CALIBRAÇÃO POR TENTATIVAS



Para a melhor visualização do Modelo QUAL-II/SEMCOG, apresenta-se, em Apêndice, uma saída completa do programa, sendo utilizados os dados da campanha de agosto/77 (CETESB).

Foram considerados os valores originais, da Tabela VII.1, para os parâmetros  $K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$ .

Objetivando a execução dos gráficos finais, foram inseridas algumas rotinas que forneceram: perfil de OD e DBO, perfil de OD e pontos observados e perfil de OD e sua envoltória (valores mínimos e máximos observados).

VII.2. Calibração do Modelo QUAL-II/SEMCOG utilizando o Método de Quasilinearização para o Caso em Estudo - Campanha de Agosto/77.

Para calibrar, automaticamente, os parâmetros  $K_1$  e  $K_2$ , do modelo, foram criadas duas novas rotinas: SUPORT e QUASI.

Essas rotinas foram inseridas no QUAL-II, logo após a leitura dos dados (rotina INDATA) e cálculo das velocidades (rotina HYDRAU), Figura V.1.

A SUPORT prepara as informações necessárias à QUASI; ou seja, transforma os 16 trechos originais simulados em 8 trechos para a otimização. Calcula para os novos trechos, criados a partir da união de alguns, comprimento, número de elementos computacionais, velocidade e intervalo de integração. Para isto, faz uso de alguns dados lidos através da INDATA.

Como na simulação considerou-se estado permanente, o intervalo de integração,  $\Delta t$ , foi calculado tomando-se a velocidade média constante no trecho, dividida pelo comprimento total do mesmo.

A rotina QUASI representa uma extensão da rotina estruturada para a aplicação do método à situação hipotética (vide Fluxograma). Foram utilizadas as mesmas rotinas DVERK e LEQTLF, com diferente passo de integração.

As equações particulares e homogêneas, necessárias como entrada da rotina QUASI, foram as já referenciadas na seção V.9.

Os valores constantes assumidos para B e D no passo inicial,  $n=0$  ("chute inicial"), por sugestão de Lee e Hwang (1971) para propósitos práticos, foram tomados iguais às soluções reais das variáveis; isto é, iguais aos calculados na simulação, no início de cada um dos oito trechos considerados.

Como a calibração foi feita trecho a trecho, admitiu-se para o primeiro, por exemplo:

$$B_{n=0}(t) = 0,84$$

e

$$D_{n=0}(t) = 7,28$$

Para  $K_1$  e  $K_2$ , considerou-se:

$$K_{1,n=0}(t) = 0,10$$

e

$$K_{2,n=0}(t) = 0,10$$

Para as equações particulares, foram tomadas as seguintes condições iniciais:

$$B_{p,n+1}(0) = B_0 = 0,84$$

$$D_{p,n+1}(0) = D_0 = 7,28$$

$$K_{1p,n+1}(0) = 0$$

$$K_{2p,n+1}(0) = 0$$

e para as homogêneas:

$$B_{h_1,n+1}(0) = 0$$

$$B_{h_2,n+1}(0) = 0$$

$$D_{h_1,n+1}(0) = 0$$

$$D_{h_2,n+1}(0) = 0$$

$$K_{1h_1,n+1}(0) = 1$$

$$K_{1h_2,n+1}(0) = 0$$

$$K_{2h_1,n+1}(0) = 0$$

$$K_{2h_2,n+1}(0) = 1$$

## CAPÍTULO VIII

## VIII. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

A simulação matemática baseada nas equações de processos físicos é um instrumento, relativamente novo, que tem se tornado bastante útil no processo de planejamento e controle da qualidade de água.

Essa utilidade depende da habilidade de se obter dados suficientes e consistentes, que possam ser utilizados para calibrar e verificar um modelo que se deseja empregar em futuras simulações.

Devem ser estimados, também, o custo e o trabalho associados ao uso de modelos computacionais, comparar métodos de otimização e levar em conta a qualidade e alcance da informação que poderá ser obtida através de diferentes métodos.

O uso de modelos de simulação, por outro lado, é caracterizado por um gasto de tempo e trabalho, relativamente significativo, para primeira simulação; ao passo que somente um esforço marginal (geralmente, apenas a mudança de alguns valores de entrada) será requerido para se processar todas as outras simulações.

O modelo matemático QUAL-II, versão SEMCOG, provou ser bastante bem estruturado, aceitando, sem problemas, a inclusão de novas rotinas, como a SUPORT e a QUASI, para a otimização e as utilizadas para graficar os perfis de OD e DBO.

Devido ao fato do modelo constar de várias rotinas (28 ao todo), o tempo gasto para a compilação e execução apresentava-se ineficiente, implicando num programa relativamente caro. Em razão disso, foi utilizado o artifício BINDER - isto é, um compilador que une dados, programa principal e uma ou mais rotinas, compilados separadamente, em um único programa executável. Entre outras vantagens, o BINDER oferece a facilidade de compilar partes separadas do programa, reduzindo tempo de máquina e, conseqüentemente, o custo da aplicação do mesmo.

A saída completa de uma simulação com os dados necessários ao QUAL-II (como a do Apêndice), sendo o programa em linguagem FORTRAN IV, utilizando o BINDER e o sistema BURROUGHS 6700 do NCE/UFRJ, apresenta os seguintes valores:

tempo de execução = 12 s  
tempo de E/S = 3 s  
linhas impressas = 993  
custo do JOB (USC) = 123,65

O tempo de execução do programa em questão está relacionado, linearmente, com:

- o número de constituintes simulados,
- o número de elementos computacionais do sistema, e
- o número de passos de tempo simulados quando a opção de simulação dinâmica é requerida.

Um dos principais objetivos deste trabalho foi a análise da estrutura e potencialidades de um modelo matemático, escolhido para simular a qualidade da água de um rio (no caso, o

Atibaia). Com esta finalidade, tentou-se adequar os dados disponíveis aos requisitados pelo QUAL-II/SEMCOG, uma vez que esses dados foram aproveitados de um estudo realizado pela CETESB e não, coletados diretamente para a aplicação do modelo.

Contudo, os perfis de OD e DBO, obtidos com a simulação, apresentaram as mesmas características que os obtidos pela CETESB, com uma razoável aproximação aos pontos observados (vide Apêndice). Os resultados obtidos com os dados da campanha de agosto/77 foram bastante significativos. Com relação aos aspectos qualitativos da água do rio Atibaia, verificou-se que a partir do Km 30, a jusante da foz do ribeirão Anhumas, essa qualidade é bastante precária. Apresentando valores como 7,08 mg/l de OD a montante da foz, esse nível desce para zero (0) devido à grande concentração de fábricas no pequeno trecho a jusante.

Foram simuladas, também, as campanhas de setembro/77 e julho/78. A qualidade da água nesses meses, apresentou-se pior que em agosto, a jusante do ribeirão das Cabras. Tendo ocorrido vazões bem menores nesse trecho, a concentração de OD caiu bruscamente, atingindo valores menores que 4 mg/l.

Além da análise de sensibilidade, feita com as várias fórmulas de cálculo de  $K_2$  e do ajuste por tentativas, variando  $K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$ , outros parâmetros foram variados afim de se testar sua influência no modelo. Verificou-se a pouca influência do valor do coeficiente de dispersão,  $D_L$ , que teve seu valor decrescido até próximo a zero, resultando efeito insignificante na curva de OD.

As taxas de decaimento de Nitrogênio demonstraram sua influência nas concentrações de OD e das formas de Nitrogênio. As concentrações de Fósforo e Nitrato pouco influenciaram a concentração de todos os constituintes envolvidos.

No tocante à parte da calibração dos parâmetros  $K_1$  e  $K_2$ , através da QUASILINEARIZAÇÃO, convém ressaltar que a bibliografia corrente faz referência somente a aplicações a casos hipotéticos. Como exemplo, os trabalhos de Lee e Hwang (1971) e Cárdenas (1974), utilizando modelos bem simplificados e o trabalho de Hughto e Loucks (1977) que aplica o método às equações do QUAL-II, linearizando-as para, posteriormente, solucioná-las pelo Método Galerkin de elementos finitos.

No capítulo VI foi discutido o programa estruturado e os valores assumidos na aplicação ao caso hipotético. Neste, com dados gerados, os resultados foram muito satisfatórios, apresentando uma rápida convergência, com um tempo de execução relativamente pequeno. A integração foi feita com um passo de tempo,  $\Delta t = 0,01$ , com  $0 \leq t \leq 1$ , ou seja, utilizando 100 valores "observados", sendo alcançada a convergência em apenas 5 iterações, totalizando um tempo de execução de 40 segundos.

Para o caso real, isto é, utilizando-se a campanha de agosto/77 os resultados já não foram satisfatórios.

Será discutida a tentativa de calibração apenas para um trecho, pois para n trechos o procedimento é idêntico.

Para o primeiro trecho (Km 110 a Km 105), com um comprimento total de 5Km, foi calculada a velocidade média, 0,107 m/s, resultando um tempo de trânsito igual a 46.728 s.

Utilizando a rotina DVERK, variou-se os tempos de integração, considerando-se  $\Delta t = 467,28s$  e  $\Delta t = 46,73s$ , ou seja, integrando-se com 100 e 1000 pontos respectivamente.

Uma outra variação feita foi com os dados observados utilizados na comparação dos mínimos quadrados. Só se dispunha de dois pontos observados no trecho, um de OD (7,2 mg/l) e um de DBO (0,83 mg/l) medidos pela CETESB, no mesmo local. Foram feitas tentativas utilizando somente esses dados, e ainda considerando-os constantes ao longo de todo o trecho.

Os resultados obtidos a partir de todas as diferentes combinações com esses valores foram insatisfatórios, resultando uma divergência acentuada a partir da 2ª iteração.

Como a rotina DVERK não é muito eficiente na resolução de sistema de equações onde as soluções são requeridas em um grande número de pontos muito próximos, por exemplo, quando se requer uma saída gráfica, lançou-se mão de um outro método de integração, visando suprir esta deficiência.

Usou-se então a rotina DGEAR, também do NCE/UFRJ, que resolve sistemas de equações diferenciais pelo Método Implícito de Adams (Preditor-Corretor). Mais uma vez, os resultados não foram satisfatórios.



## CAPÍTULO IX

## IX. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O estudo envolvendo a análise de modelos de qualidade de água, a escolha do QUAL-II/SEMOG e da técnica de Quasilinearização para a calibração do mesmo resultou nas seguintes conclusões e recomendações:

- O modelo Qual-II/SEMOG é de fácil compreensão e de grande versatilidade. Permite fácil adição de novas rotinas e estabelece boa concordância com os dados observados.

- O coeficiente de reaeração influi, de maneira decisiva na concentração de OD, sendo a equação de O'Connor e Dobbins a que fornece melhores resultados.

- A calibração por tentativa e erro, apesar de não ser precisa e por vezes, resultar num trabalho infrutífero, pode ser uma boa alternativa quando a calibração automática não fornecer resultados satisfatórios.

- A técnica de Quasilinearização se mostra bastante eficaz para casos hipotéticos, onde são utilizados pequenos intervalos de integração e grande número de dados "observados".

- Faz-se necessária a obtenção de maior quantidade de dados reais e informações significativas de campo, para que se tenha, de forma mais realística, a minimização da diferença en-

tre os dados observados e calculados no processo de calibração. Há, porém, que se levar em conta, o trabalho e alto custo envolvido na obtenção destes dados.

- Faz-se necessário o estudo de outras rotinas mais eficientes, para a resolução das equações diferenciais linearizadas pelo método de Newton-Raphson, que forneçam a convergência necessária quando se trata com dados reais; isto é, com grandes intervalos de integração.

Baseado nos resultados obtidos com este trabalho, recomenda-se:

- A utilização do modelo QUAL-II/SEMCOG para o planejamento e controle de poluição em rios, sendo empregado para avaliar a capacidade de recuperação dos rios (atual e futura) para diferentes níveis de tratamento das cargas orgânicas, em diversas ocorrências de vazões e condições críticas de cabeceira. Ainda, em conjunção com um programa de amostragem de campo, para identificar a magnitude e características de fontes não-pontuais de poluição. Operando o modelo dinamicamente, será possível estudar as variações diurnas de Oxigênio Dissolvido devido ao crescimento e respiração das algas, e também analisar o impacto causado por fontes periódicas ou sazonais.

- Para que futuros usuários não percam tempo, tentando analisar resultados distorcidos, obtidos com a aplicação do modelo, algumas considerações devem ser feitas:

- Após a discretização do sistema, verificar se os coeficientes de fluxo  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$ , especificados, são realmente típicos para todo o trecho, e não para somente uma seção de controle do rio.

- Após a verificação dos dados hidráulicos, efetuar uma "rodada" para uma análise prévia do comportamento do modelo. Nesse ponto, verificar se está sendo assegurada a continuidade de fluxo, uma vez especificadas as fontes de cabeceira e pontos de despejo. Examinar, criteriosamente, os dados, tipo 4 (matriz com a especificação do tipo dos elementos computacionais) e os dados tipo 9 (junções existentes). A maioria dos problemas, gerados na simulação, decorrem de erros, em um desses dois tipos de dados de entrada.

- A continuação desse estudo, que vislumbra ser um campo fértil para pesquisa; considerando para tal, o uso de outras rotinas de integração, a obtenção de maior quantidade de dados, e a utilização da Quasilinearização para calibrar, não somente, trecho a trecho, mas todos os trechos do modelo, num processo contínuo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ADENEY, W.E.; BECKER, H.G. - The Determination of the Rate of Solution of Atmospheric Nitrogen and Oxygen by Water. Philosophical Magazine, 1919, V.38, pp. 317-338.
2. BAIN, R.C. - Predicting DO Variations Caused by Algae. Journal of Sanitary Engineering Division, 1968, Oct., V.94, No. SA5, pp. 867-881.
3. BANSAL, M.K. - Dispersion in Natural Streams. Journal of the Hydraulics Division, 1971, Nov., V.97, No. HY11, pp. 1867-1886.
4. BARTONE, C.R.; CASTAGNINO, W.A. - SIMOX- Programa de Computacion y Manual para Usuários. Centro Panamericano de Ingenieria Sanitaria y Ciencias del Ambiente, Lima, Perú, 1973, 82p.
5. BELLA, D.A.; DOBBINS, W.E. - Difference Modeling of Stream Pollution. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1968, Oct., V.94, No. SA5, pp. 995-1016.
6. BELLMAN, R.E.; KALABA, R.E. - Quasilinearization and Non-Linear Boundary -Value Problems, American Elsevier Publishing Company, Inc., N.Y., 1965, 208 p.
7. BELTAOS, S. - Longitudinal Dispersion in Rivers. Journal of the Hydraulics Division, 1980, Jan., V.106, No. HY1, pp. 151-172.

8. BOYLE, W.E.; BERTHOEUX, P.M.; ROONEY, T.C. - Pitfalls in Parameter Estimation for Oxygen Transfer Data. Journal of the Environmental Engineering Division, 1974, Apr., V.100, No. EE 2, pp. 391-408.
9. BRANCO, S.M.; ROCHA, A.A. - Poluição, Proteção e Usos Múltiplos de Represas. Edgard Blücher, CETESB, São Paulo, 1977, 185 p.
10. CAMP, T.R. - Field Estimates of Oxygen Balance Parameters. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1965, V.91, No. SA5, pp. 1-16.
11. CÁRDENAS, M.A. - La Ingenieria de Sistemas. Editora Limusa S.A., México, 1974, 293 p.
12. CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. Projeto Piloto do Rio Atibaia, São Paulo, 1981, Maio, 335p.
13. CHATWIN, P.C. - Presentation of Longitudinal Dispersion Data. Journal of the Hydraulics Division, 1980, Jan., V.106, No. HY1, pp. 71-83.
14. CHURCHILL, M.A.; ELMORE, H.L.; BUCKINGHAM, R.A. - The Predicting of Stream Reaeration Rates. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1962, Jul., V.88, No.4, pp. 1-16.
15. CONSTABLE, T.W.; Mc BEAN, E.A. - Kalman Filter Modeling of the Speed River Quality. Journal of the Environmental Engineering Division, 1979, Oct., V.105, No. EE5, pp.961-978.

16. DEININGER, R.A. - Models for Environmental Pollution Control,  
Ann Arbor Science, Ann Arbor, 1973, 448 p.
17. DI TORO, D.M. - Stream Equations and Methods of Characteristics.  
Journal of the Sanitary Engineering Division, 1969, Aug.,  
V.95, No.4, pp. 699-703.
18. DOBBINS, W.E. - BOD and Oxygen Relationships in Streams.  
Journal of the Sanitary Engineering Division, 1964, Jun.,  
V.90, No. SA3, pp. 53-78.
19. DOBBINS, W.E. - Closure to BOD and Oxygen Relationships in  
Streams. Journal of the Sanitary Engineering Division,  
1965, V.91, No. SA5, pp. 49-55.
20. DOSAG-I - Simulation of Water Quality in Streams and Canals,  
Program documentation and users manual. Texas Water  
Development Board, Austin, 1970, 50 p.
21. DRESNACK, R.; DOBBINS, W.E. - Numerical Analysis of BOD and  
DO Profiles. Journal of the Sanitary Engineering Division,  
1968, Oct., V.94, No. SA5, pp. 789-807.
22. FRIED, J.J. - Groundwater Pollution. Elsevier, Amsterdam,  
1975, 330 p.
23. GRIMSRUD, G.P.; FINNEMORE, E.J.; OWEN, H.J. - Evaluation of  
Water Quality Models: A Management Guide for Planners.  
U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C.,  
1976, Jul., 176 p.

24. HAIMES, Y.Y. - Hierarchical Analysis of Water Resources Systems.  
Mc Graw Hill, 1977, 477 p.
25. HAIMES, Y.Y.; WISMER, D.A. - Integrated System Modeling and Optimization Via Quasilinearization. Journal of Optimization Theory and Applications, 1971, V.8, No.2, pp. 100-109.
26. HARDEN, T.O.; SHEN, H.T. - Numerical Simulation of Mixing in Natural Rivers. Journal of the Hydraulics Division, 1979, Apr., V.105, No. HY4, pp. 393-408.
27. HAYS, J.R. - Mass Transport Phenomena in Open Channel Flow.  
Thesis presented to Vanderbilt University, Nashville, Tennessee, in partial fulfillment of the requirements for the degree of Ph.D., 1966.
28. HORNBERGER, G.M. - Uncertainty in Dissolved Oxygen Prediction Due to Variability in Algae Photosynthesis. Advances in Water Resources, 1979, Jan., V.14, pp. 355-361.
29. HORNBERGER, G.M.; KELLY, M.G.; ELLER, R.M. - The Relationship Between Light and Photosynthetic Rate in a River Community and Implications for Water Quality Modeling. Water Resources Research, 1976, Aug., V.12, No.4, pp. 723-730.
30. HOWE, R.H.L. - Proposed Modification of  $K_2$  - Temperature Relation. Journal of the Environmental Engineering Division, 1977, Aug., V.103, No. EE4, pp. 729-732.

31. HUGHTO, R.J.; LOUCKS, D.P. - A Multi-Parameter Water Quality Management Model for River Basins. Selected Water Resources Abstracts, 1977, Nov., NTIS-PB-275 588, 73 p.
32. KING, P.H. - Water Quality Modeling in the Upper Reaches of the Chowan River. Water Resources Bulletin, 1980, Feb., V.16, No.1, pp. 118-126.
33. KOIVO, H.N.; KOIVO, A.J. - Least-Squares Estimator for Polluted Stream Variables in a Distributed Parameter Model. Advances in Water Resources, 1978, V.1, No.4, pp. 191-194.
34. KOIVO, A.J.; PHILLIPS, G.R. - Identification of Mathematical Models for DO and BOD Concentrations in Polluted Streams from Noise Corrupted Measurements. Water Resources Research, 1971, Aug., V.7. No.4, pp. 853-862.
35. KOIVO, A.J.; PHILLIPS, G.R. - On Determination of BOD and Parameters in Polluted Stream Models from DO Measurements Only. Water Resources Research, 1972, Apr., V.8, No.2, pp. 478-486.
36. KRENKEL, P.A.; ORLOB, G.T. - Turbulent Diffusion and Reaeration Coefficient. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1962, Mar., V.88, No. SA2, pp. 53-83.
37. LANGBIEN, W.B.; DURUM, W.H. - The Aeration Capacity of Streams. U.S. Geological Survey, 1967, Paper No. 542, 6 p.
38. LEE, E.S. - Quasilinearization and Invariant Imbedding. Academic Press, Inc., N.Y., 1968, 329 p.



39. LEE, E.S.; HWANG, I. - Stream Quality Modeling by Quasilinearization. Journal of Water Pollution Control Federation, 1971, Feb., V.43, No.2, pp. 306-316.
40. LEGISLAÇÃO BÁSICA - Secretaria Especial do Meio Ambiente - SEMA. Ministério do Interior, Diário Oficial da União, 1976, Maio, 27 p.
41. LIN, S.H.; FAN, L.T.; HWANG, C.L. - Digital Simulation of the Effect of Thermal Discharge on Stream Water Quality. Water Resources Bulletin, 1973, Aug., V.9, No.4, pp.689-702.
42. METZGER, I. - Effects of Temperature on Stream Aeration. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1968, Dec., V.94, No. SA6, pp. 1153-1159.
43. MONTEIRO, J.R.R. - Elementos para uma Política Ambiental. Saneamento, 1978, Jul./Dez., V.52, No.3 e 4, pp. 94-100.
44. NEMEROW, N.L. - Scientific Stream Pollution Analysis. Mc Graw Hill, N.Y., 1974, 358 p.
45. O'CONNEL, R.L.; THOMAS, N.A. - Effect of Bentic Algae on Stream Dissolved Oxygen. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1965, Jun., V.91, No. SA3, pp.1-16.
46. O'CONNOR, D.J. - The Temporal and Spatial Distribution of Dissolved Oxygen in Streams. Water Resources Research, 1967, V.3, No.1, pp. 65-79.

47. O'CONNOR, D.J.; DI TORO, D.M. - Photosynthesis and Oxygen Balance in Streams. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1970, Apr., V.96, No. SA2, pp. 547-571.
48. O'CONNOR, D.J.; DOBBINS, W.E. - Mechanism of Reaeration in Natural Streams. American Society Civil Engineers Trans. 1958, V.123, pp. 641-684.
49. O'CONNOR, D.J.; THOMANN, R.V.; MANCINI, J.L. - Simplified Mathematical Modeling of Water Quality. Hydrosience, Inc. Water Programs, Environmental Protection Agency, Washington D.C., 1971, Mar., 127 p.
50. O'CONNOR, D.J.; THOMANN, R.V.; MANCINI, J.L. - Addendum to Simplified Mathematical Modeling of Water Quality. Water Programs, Environmental Protection Agency, Washington D.C., 1972, May, 43 p.
51. OLDAKER, W.H. - Bottom Deposits in a River and their Potencial Effects on Dissolved Oxygen Concentrations. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1958, Sept., V.84, No. SA5, pp. 1-7.
52. OWENS, M.; EDWARDS, R.W.; GIBBS, J.W. - Some Reaeration Studies in Streams. International Journal Air and Water Pollution, 1964, V.8, pp. 469-486.
53. PATTERSON, C.C.; GLOYNA, E.F. - Dispersion Measurements in Open Channels. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1965, Jun., V.91, No. SA3, pp. 17-29.

54. RALSTON, A.; WILF, H.S. - Mathematical Methods for Digital Computers. John Wiley & Sons, Inc., N.Y., 1965, Aug., V.1, 293 p.
55. RAMALHO, R.S. - Introduction to Wastewater Treatment Processes. Academic Press, Inc., London, 1977, 409 p.
56. RATHBUN, R.E. - Reaeration Coefficients of Streams - State-of-the-Art. Journal of the Hydraulics Division, 1977, Apr., V.103, No. HY4, pp. 409-424.
57. RICH, L.G. - Environmental Systems Engineering. Mc Graw Hill Kogakusha, Tokyo, 1973, 448 p.
58. RINALDI, S.; ROMANO, P.; SONCINI-SESSA, R. - Parameter Estimation of Streeter-Phelps Models. Journal of the Environmental Engineering Division, 1979, Feb., V.105, No.EE1, pp.75 - 88.
59. RINALDI, S.; SONCINI-SESSA, R.; STEHFEST, H.; TAMURA, H. - Modeling and Control of River Quality. Mc Graw Hill, 1979, 380 p.
60. ROESNER, L.A.; GIGUERE, P.R.; EVENSON, D.E. - QUAL - II - Simulation of Water Quality in Streams and Canals. Program Documentation and User's Manual. Water Resources Engineers, Inc., Walnut Creek, California, 1977, 298p.
61. RUTHEFORD, J.C. - Modeling Effects of Aquatic Plants in Rivers. Journal of the Environmental Engineering Division, 1977, Aug., V.103, No. EE4, pp. 575-591.

62. SHASTRY, J.S.; FAN, L.T.; ERICKSON, L.E. - Non-linear Parameter Estimation in Water Quality Modeling. Journal of the Environmental Engineering Division, 1973, Jun., V.99, No. EE3, pp. 315-331.
63. STONE, H.L.; BRIAN, P.O.T. - Numerical Solution of Convective Transport Problems. Journal of the American Institute of Chemical Engineers, 1963, V.9, No.5
64. STREETER, H.W.; PHELPS, E.B. - A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River. Public Health Bulletin, Washington, 1925, No.146, 75 p.
65. STREETER, H.W. - The Rate of Atmospheric Reaeration of Sewage-Polluted Streams. Public Health Reports, 1926, Feb., V.41, No.7.
66. STROBEL, G.A. - Coliform-Fecal Coliform Bacteria in Tidal Waters. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1968, Aug., V.94, No. SA4, pp. 641-657.
67. TACKSTON, E.L.; KRENKEL, P.A. - Reaeration Prediction in Natural Streams. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1969, Feb., V.95, No. SA1, pp. 65-94.
68. TACKSTON, E.L.; SCHNELLE, Jr. K.B. - Predicting Effects of Dead Zones on Stream Mixing. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1970, Apr., V.96, No. SA2, pp.319-331.

69. THOMANN, R.V. - Mathematical Model for Dissolved Oxygen. Journal of the Sanitary Engineering Division, 1963, Jun., V.91, No. SA3, pp. 1-30.
70. THOMANN, R.V. - Recent Results from a Mathematical Model of Water Pollution Control in the Delaware Estuary. Water Resources Research, 1965, V.1, No.3.
71. THOMAS, H.A. Jr. - Pollution Load Capacity of Streams. Water & Sewage Works, 1948, Nov., V.95, pp. 409-413.
72. THORNTON, K.W.; NIX, J.F.; BRAGG, J.D. - Coliform and Water Quality: Use of Data in Project Design and Operation. Water Resources Bulletin, 1980, Feb., V.16, No.1, pp. 86-92.
73. TUCCI, C.E.M. - Hydraulic and Water Quality Model for a River Network. Thesis presented to Colorado State University, Fort Collins, E.U.A., in partial fulfillment of the requirements for the degree of Ph.D., 1978, 218 p.
74. VALENTINE, E.M.; WOOD, I.R. - Experiments in Longitudinal Dispersion with Dead Zones. Journal of the Hydraulics Division, 1979, Aug., V.105, No. HY8, pp. 999-1016.
75. WATER QUALITY CRITERIA - First National Meeting on Water Quality Criteria. American Society for Testing and Materials, ASTM - Special Technical Publication, Philadelphia, 1966, No. 416.

76. WHITE, W.A. - QUAL - I - Simulation of Water Quality in Streams and Canals. Program Documentation and User's Manual. Texas Water Development Board, Austin, 1970, May, Report No. 128, 142 p.
77. WRIGTH, R.M.; Mc DONNELL, A.J. - In-Stream Deoxygenation Rate Prediction. Journal of the Environmental Engineering Division, 1979, Apr., V.102, No. EE2, pp. 323-335.
78. YEH, W.W.G.; TAUXE, G.W. - Quasilinearization and the Identification of Aquifer Parameters. Water Resources Research, 1971, Apr., V.7. No.2, pp. 375-381.

**A P Ê N D I C E**

\*\*\* ( TITULOS ) \*\*\*

CARTAO		TITULOS DO PROG QUALII
TITLE01		MODELO DE QUALIDADE D'AGUA QUALII-SEMOG
TITLE02		RIO ATIBAIA - BACIA DO PARANA - SAO PAULO
TITLE03	NAO	MATERIAL CONSERVATIVO I
TITLE04	NAO	MATERIAL CONSERVATIVO II
TITLE05	NAO	MATERIAL CONSERVATIVO III
TITLE06	NAO	TEMPERATURA
TITLE07	SIM	5-DIAS DEMANDA BIOQUIMICA DE O2 (MG/L)
TITLE08	NAO	ALGAS C/ CLOROFILA A (MG/L)
TITLE09	SIM	FOSFORO C/ P (MG/L)
TITLE10	SIM	AMONIA C/ N (MG/L)
TITLE11	SIM	NITRITO C/ N (MG/L)
TITLE12	SIM	NITRATO C/ N (MG/L)
TITLE13	SIM	OXIGENIO DISSOLVIDO (MG/L)
TITLE14	SIM	COLIFORMES FECAIS (NO/100 ML)
TITLE15	NAO	MATERIAL NAO CONSERVATIVO

\*\*\* DADOS TIPO 1 ( CONTROLE ) \*\*\*

CARTAO		CARTAO	
LISTA DADOS DE ENTRADA	0.00000		0.00000
IMPRIME SUMARIO OPCIONAL	0.00000		0.00000
NAO AUMENTO DE FLUXO	0.00000		0.00000
ESTADO PERMANENTE	0.00000		0.00000
NAO SECOS TRAPEZOIDAIS	0.00000		0.00000
INPUT UNIDADES METRICAS =	1.00000	OUTPUT UNIDADES METRICAS =	1.00000
NUMERO DE TRECHOS =	16.00000	NUMERO DE JUNCOES =	0.00000
NUM DE FONTES/CABECEIRA =	1.00000	NUMERO DE DESPEJOS =	7.00000
PASSODE TEMPO(HORAS) =	0.00000	COMP. ELEMEN.COMPT.(KM) =	1.00000
TEMPO MAX.SIMULACAO(HRS) =	30.00000	INCREM.TEMPO P/RPT2(HRS) =	0.00000
ENDATA1	0.00000		0.00000

\*\*DADOS TIPO 1A(TAXAS P/ ALGAS E AMONIA)\*\*

CARTAO		CARTAO	
O GASTO P/OXID NH3 (MG O/MG N) =	3.5000	O GASTO P/OXID NO2 (MG O/MG N) =	1.2000
O PROD. POR ALGAS (MG O/MG A) =	1.6000	O GASTO P/ ALGAS (MG O/MG A) =	2.0000
N CONTIDO NAS ALGAS (MG N/MG A) =	0.0850	P CONTIDO NAS ALGAS (MG P/MG A) =	0.0120
MAX TAXA ESP.CRESC.ALGAS(1/DIA) =	2.5000	TAXA RESPIRACAO / ALGAS (1/DIA) =	0.1000
N MEIA CONST.SATURACAO (MG/L) =	0.3000	P MEIA CONST. SATURACAO (MG/L) =	0.0400
LUZ MEIA CONST.SAT. (LNGLY/MIN) =	0.0300	TOTAL RADIACAO DIARIA(LANGLEYS) =	400.0000
ENDATA1A	0.0000		0.0000



\*\*\* DADOS TIPO 2 (IDENTIF. DO TRECHO) \*\*\*

CARTAO	ORDEN	E IDENT.	TRECHO	R.	MI/KM	R.	MI/KM
TRECHO	1.0	KM110-R.	JACAREZ.	DE	110.0	A	105.0
TRECHO	2.0	R.	JACAREZ.-KM96	DE	105.0	A	96.0
TRECHO	3.0	KM96 -	KM91	DE	96.0	A	91.0
TRECHO	4.0	KM91 -	KM85	DE	91.0	A	85.0
TRECHO	5.0	KM85-R.	PINHEIROS	DE	85.0	A	78.0
TRECHO	6.0	R.	PINH-R.CARRAS	DE	78.0	A	73.0
TRECHO	7.0	R.	CARRAS - KM64	DE	73.0	A	64.0
TRECHO	8.0	KM64 -	KM58	DE	64.0	A	58.0
TRECHO	9.0	KM58 -	KM53	DE	58.0	A	53.0
TRECHO	10.0	KM53-PONTOS		DE	53.0	A	44.0
TRECHO	11.0	PONTOS-KM36		DE	44.0	A	36.0
TRECHO	12.0	KM36 -	RHODIA	DE	36.0	A	30.0
TRECHO	13.0	RHODIA-R.	ANHUMAS	DE	30.0	A	29.0
TRECHO	14.0	R.	ANHUMAS-REPLAN	DE	29.0	A	25.0
TRECHO	15.0	REPLAN-DUPONT		DE	25.0	A	22.0
TRECHO	16.0	DUPONT-PONTO1		DE	22.0	A	19.0
ENDATA2	0.0				0.0		0.0

\*\*\* DADOS TIPO 3 (NIVEL PADRAO P/ 00 FONTES AUMENTO DE FLUXO ) \*\*\*

CARTAO	TRECHO	FONTES	PADRAO	ORDEN	DAS	FONTES
ENDATA3	0.	0.	0.0	0.	0.	0. 0. 0. 0. 0.

\*\*\* DADOS TIPO 4 (TIPO DOS ELEMENTOS COMPUTAC. ) \*\*\*

CARTAO	TRECHO	ELEN/TRECHO	ELEMENTOS COMPUT.
VAR. CONTR.	1.	5.	1.
VAR. CONTR.	2.	9.	1.
VAR. CONTR.	3.	5.	1.
VAR. CONTR.	4.	6.	1.
VAR. CONTR.	5.	7.	1.
VAR. CONTR.	6.	5.	1.
VAR. CONTR.	7.	9.	1.
VAR. CONTR.	8.	6.	1.
VAR. CONTR.	9.	5.	1.
VAR. CONTR.	10.	9.	1.
VAR. CONTR.	11.	8.	1.
VAR. CONTR.	12.	6.	1.
VAR. CONTR.	13.	1.	1.
VAR. CONTR.	14.	4.	1.
VAR. CONTR.	15.	3.	1.
VAR. CONTR.	16.	3.	1.
ENDATA4	0.	0.	1.

\*\*\* DADOS TIPO 5(DADOS HIDRAUL. P/ DETERMINAR VELOC. E PROFUND. ) \*\*\*

CARTAO	TRECH	COEFQV	EXPQV	COEFQH	EXPQH	CMANN
COEFF.HIDR.	1.	0.033	1.001	0.313	0.561	0.030
COEFF.HIDR.	2.	0.025	0.999	0.461	0.423	0.030
COEFF.HIDR.	3.	0.025	0.999	0.461	0.423	0.030
COEFF.HIDR.	4.	0.025	0.999	0.461	0.423	0.030
COEFF.HIDR.	5.	0.025	1.010	0.762	0.366	0.030
COEFF.HIDR.	6.	0.025	1.010	0.762	0.366	0.030
COEFF.HIDR.	7.	0.033	1.006	0.579	0.340	0.030
COEFF.HIDR.	8.	0.019	0.999	1.005	0.264	0.030
COEFF.HIDR.	9.	0.019	0.999	1.005	0.264	0.030
COEFF.HIDR.	10.	0.023	1.000	0.464	0.427	0.030
COEFF.HIDR.	11.	0.023	1.000	0.464	0.427	0.030
COEFF.HIDR.	12.	0.023	1.000	0.464	0.427	0.030
COEFF.HIDR.	13.	0.033	1.000	0.390	0.352	0.030
COEFF.HIDR.	14.	0.033	1.000	0.390	0.352	0.030
COEFF.HIDR.	15.	0.033	1.000	0.390	0.352	0.030
COEFF.HIDR.	16.	0.033	1.000	0.390	0.352	0.030
ENDATA5	0.	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

\*\*\* DADOS TIPO 6 (TAXAS DE DESOXIGENACAO , REAERACAO E SEDIMENTACAO ) \*\*\*

CARTAO	TRECHO	K1	K3	K2OPT	K2	COEQK2, OR TSIV COEF FOR OPT 8	EXPQK2, OR SLOPE FOR OPT 8
COEFF.REAC.	1.	0.65	0.00	1.	0.47	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	2.	0.69	0.00	1.	1.15	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	3.	0.69	0.00	1.	1.15	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	4.	0.69	0.00	1.	0.40	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	5.	0.70	0.00	1.	4.20	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	6.	0.70	0.00	1.	0.86	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	7.	0.70	0.00	1.	1.28	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	8.	0.70	0.00	1.	3.50	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	9.	0.70	0.00	1.	3.50	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	10.	0.71	0.00	1.	3.55	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	11.	0.72	0.00	1.	0.82	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	12.	0.72	0.00	1.	0.82	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	13.	0.72	0.00	1.	0.45	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	14.	0.72	0.00	1.	1.43	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	15.	0.72	0.00	1.	1.58	0.000	0.000000
COEFF.REAC.	16.	0.76	0.00	1.	2.38	0.000	0.000000
ENDATA6	0.	0.00	0.00	0.	0.00	0.000	0.000000

\*DADOS TIPO 6A(CTES ALGAS,NITROG. E FOSFORO)\*

CARTAO	TRECH	ALPHA0	ALGSET	CKNH3	CKNO2	SNH3	SP04
COEFF. P/ ALGAS, N, P	1.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	2.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	3.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	4.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	5.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	6.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	7.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	8.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	9.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	10.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	11.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	12.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	13.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	14.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	15.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
COEFF. P/ ALGAS, N, P	16.	50.00	0.15	0.15	1.00	0.00	0.00
ENDATA6A	0.	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

\*\*\* DADOS TIPO 6B(OUTROS COEFICIENTES)\*\*\*

CARTAO	TRECH,	CK4	CK5	EXCOEF	CK6
OUTROS COEFICIENTES	1.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	2.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	3.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	4.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	5.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	6.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	7.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	8.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	9.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	10.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	11.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	12.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	13.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	14.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	15.	0.00	1.500	3.80	0.00
OUTROS COEFICIENTES	16.	0.00	1.500	3.80	0.00
ENDATA6B	0.	0.00	0.00	0.00	0.00

\*\*\* DADOS TIPO 7(CONDICOES INICIAIS) \*\*\*

CART	TIPO	TRECH	TEMP	O.D.	DBO,	MC-1	MC-2	MC-3
CONDICOES	INICIAIS	1.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	2.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	3.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	4.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	5.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	6.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	7.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	8.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	9.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	10.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	11.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	12.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	13.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	14.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	15.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CONDICOES	INICIAIS	16.	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ENDATA7		0.	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

\*\*\* DADOS TIPO 7A(CONDICOES INICIAIS P/ CLOROFILA A, NITROGENIO, FOSFORO ,  
COLIFORMES E SELECIONADOS MATER. NAO-CONSERVATIVOS) \*\*\*

CARTAO	TIPO	TRECH	CLOROF	NH3/N	NO2/N	NO3/N	DOP	COLI	NAOCON
COND.	INICIAIS	1.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	2.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	3.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	4.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	5.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	6.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	7.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	8.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	9.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	10.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	11.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	12.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	13.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	14.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	15.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
COND.	INICIAIS	16.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
ENDATA7A		0.	0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000

\*\*\* DADOS TIPO 8(CONDICOES DE FLUXOINCREMENTAL) \*\*\*

CARTAO	TRECH	Q	TEMP	O.D.	DBO	MC-1	MC-2	MC-3
FLUXO INCREMENTAL	1.	1.200	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	2.	1.800	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	3.	1.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	4.	0.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	5.	0.200	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	6.	1.600	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	7.	0.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	8.	0.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	9.	0.100	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	10.	0.100	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	11.	0.110	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	12.	0.090	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	13.	0.010	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	14.	0.490	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	15.	0.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
FLUXO INCREMENTAL	16.	0.000	20.0	9.9	0.0	0.0	0.0	0.0
ENDATAB	0.	0.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

\*\*\* DADOS TIPO 8A(COND. DE FLUXO INCREMENTAL PARA CLOROFILA A , NITROGENIO , FOSFORO , COLIFORMES E CONSTITUINTES NAO-CONSERVATIVOS ) \*\*\*

CARTAO	TRECH	CLORA	NH3/N	NO2/N	NO3/N	DOF	COLI	NADCON
FLUXO INCREMEN	1.	0.00	0.00	0.01	0.35	0.06	770.0	0.000
FLUXO INCREMEN	2.	0.00	0.26	0.01	0.34	0.09	12000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	3.	0.00	0.26	0.01	0.34	0.09	12000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	4.	0.00	0.23	0.02	0.37	0.06	18000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	5.	0.00	0.05	0.02	0.44	0.06	7900.0	0.000
FLUXO INCREMEN	6.	0.00	0.17	0.02	0.35	0.06	14000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	7.	0.00	0.20	0.03	0.42	0.05	3300.0	0.000
FLUXO INCREMEN	8.	0.00	0.20	0.03	0.42	0.05	3300.0	0.000
FLUXO INCREMEN	9.	0.00	0.20	0.03	0.42	0.05	3300.0	0.000
FLUXO INCREMEN	10.	0.00	0.11	0.04	0.51	0.07	380.0	0.000
FLUXO INCREMEN	11.	0.00	0.11	0.04	0.51	0.07	380.0	0.000
FLUXO INCREMEN	12.	0.00	0.11	0.04	0.51	0.07	380.0	0.000
FLUXO INCREMEN	13.	0.00	2.11	0.05	0.03	0.35	2100000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	14.	0.00	2.11	0.05	0.03	0.35	2100000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	15.	0.00	2.11	0.05	0.03	0.35	2100000.0	0.000
FLUXO INCREMEN	16.	0.00	1.76	0.08	0.16	0.12	1100000.0	0.000
ENDATABA	0.	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.0	0.000

\*\*\* DADOS TIPO 9 ( JUNCÕES ) \*\*\*

CARTAO ENDATA9	JUNCAO 0.	ORDEN E IDENTIF	MONTAN 0.	JUNCAO 0.	TRIB 0.
-------------------	--------------	-----------------	--------------	--------------	------------

\*\*\* DADOS TIPO 10(FONTES CABECEIRA ) \*\*\*

CARTAO FONTE-CABE ENDATA10	FONTE 1.	ORDEN E IDENT.	FLUXO 2.500 0.000	TEMP 19.30 0.00	O.D. 7.10 0.00	DBO 1.00 0.00	MC-1 0.00 0.00	MC-2 0.00 0.00	MC-3 0.000 0.000
	0.	CACHOEIRA+ATIBAINHA							

\*\*\* DADOS TIPO 10A(COND.DE CLOROFILA,NITROGENIO, FOSFORO, COLIFORMES E MATER., ,  
NAO-CONSERVATIVOS NAS FONTES DE CABECEIRA ) \*\*\*

CARTAO F. CABEC.-2 ENDATA10A	FONTE 1.	CLORA	NH3/N 0.00 0.00	NO2/N 0.01 0.00	NO3/N 0.33 0.00	DOF 0.06 0.00	COLI 2100.00 0.00	NAOCON 0.000 0.000
	0.							

\*\*\* DADOS TIPO 11(CARACTERISTICAS DAS FONTES POLUIDORAS ) \*\*\*

CARTAO DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR ENDATA11	ORDEN E IDENTIF.	FONTE	FEL	FLUXO	TEMP	O.D.	DBO	MC-1	MC-2	MC-3
	1.	RIB. JACAREZINHO	0.00	0.200	20.00	0.00	179.40	0.00	0.00	0.000
	2.	RIB. PINHEIROS	0.00	0.800	20.00	0.00	90.77	0.00	0.00	0.000
	3.	R. DAS CABRAS	0.00	0.200	20.00	0.00	103.00	0.00	0.00	0.000
	4.	RHODIA	0.00	0.010	20.00	0.00	9537.00	0.00	0.00	0.000
	5.	R. ANHUMAS	0.00	0.100	20.00	0.00	1889.00	0.00	0.00	0.000
	6.	REPLAN	0.00	0.050	20.00	0.00	1944.00	0.00	0.00	0.000
	7.	DUPONT	0.00	0.050	20.00	0.00	565.90	0.00	0.00	0.000
	0.		0.00	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000

\*\*\* DADOS TIPO 11A(CARACT. DAS FONTES POLIDORAS - CLOROFILA A, NITROGENIO, FOSFORO ,  
COLIFORMES E CONSTITUINTES NAO-CONSERVATIVOS SELEC.) \*\*\*

CARTAO DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR DESP/RETIR ENDATA11A	ORDEN E IDENTIF.	FONTE	CLORA	NH3/N	NO2/N	NO3/N	DOF	COLI	NAOCON
	1.	RIB. JACAREZINHO	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	2.	RIB. PINHEIROS	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	3.	R. DAS CABRAS	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	4.	RHODIA	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	5.	R. ANHUMAS	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	6.	REPLAN	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000
	7.	DUPONT	0.000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.000

\*\*\*\*\* SIMULACAO PERMANENTE \*\*\*\*\*

TRE NUM	ELT NUM	DE KILO	A KILO	FLUXO (CHS)	FONTE PONTUAL	INCR FLUX	TEMP GRA C	OD (MG/L)	DBO (MG/L)	NH3-N (MG/L)	NO3-N (MG/L)	DIS-O-F (MG/L)	CLO A (UG/L)	COLI /100ML
1	1	110.0	109.0	2.74	0.00	0.24	22.00	7.28	0.84	0.00	0.00	0.06	0.00	1665.
2	1	109.0	108.0	2.98	0.00	0.24	22.00	7.44	0.72	0.00	0.00	0.06	0.00	1355.
3	1	108.0	107.0	3.22	0.00	0.24	22.00	7.58	0.62	0.00	0.00	0.06	0.00	1128.
4	1	107.0	106.0	3.46	0.00	0.24	22.00	7.70	0.54	0.00	0.00	0.06	0.00	958.
5	3	106.0	105.0	3.70	0.00	0.24	22.00	7.81	0.48	0.00	0.00	0.06	0.00	828.
6	1	105.0	104.0	4.10	0.20	0.20	22.00	6.81	0.59	0.01	0.00	0.06	0.00	1160.
7	2	104.0	103.0	4.50	0.00	0.20	22.00	6.41	0.62	0.02	0.00	0.06	0.00	1433.
8	2	103.0	102.0	4.50	0.00	0.20	22.00	6.16	0.80	0.03	0.00	0.06	0.00	1646.
9	2	102.0	101.0	4.70	0.00	0.20	22.00	6.02	0.99	0.04	0.00	0.06	0.00	1817.
10	6	101.0	100.0	4.90	0.00	0.20	22.00	5.96	0.49	0.05	0.00	0.06	0.00	1954.
11	7	100.0	99.0	5.10	0.00	0.20	22.00	5.95	0.96	0.06	0.00	0.07	0.00	2067.
12	8	99.0	98.0	5.30	0.00	0.20	22.00	5.97	0.50	0.06	0.00	0.07	0.00	2200.
13	9	98.0	97.0	5.50	0.00	0.20	22.00	6.03	0.44	0.07	0.00	0.07	0.00	2331.
14	9	97.0	96.0	5.70	0.00	0.20	22.00	6.10	0.74	0.08	0.00	0.07	0.00	2493.
15	1	96.0	95.0	5.90	0.00	0.20	22.00	6.19	0.43	0.08	0.00	0.07	0.00	2644.
16	1	95.0	94.0	6.10	0.00	0.20	22.00	6.28	0.33	0.09	0.00	0.07	0.00	2888.
17	1	94.0	93.0	6.30	0.00	0.20	22.00	6.37	0.90	0.09	0.00	0.07	0.00	3124.
18	1	93.0	92.0	6.50	0.00	0.20	22.00	6.47	0.68	0.10	0.00	0.07	0.00	3455.
19	1	92.0	91.0	6.70	0.00	0.20	22.00	6.57	0.48	0.10	0.00	0.07	0.00	3817.
20	4	91.0	90.0	6.90	0.00	0.20	22.00	6.53	0.37	0.10	0.00	0.07	0.00	4247.
21	4	90.0	89.0	7.10	0.00	0.20	22.00	6.44	0.29	0.10	0.00	0.07	0.00	4735.
22	4	89.0	88.0	7.30	0.00	0.20	22.00	6.36	0.16	0.10	0.00	0.07	0.00	5283.
23	4	88.0	87.0	7.50	0.00	0.20	22.00	6.29	0.06	0.10	0.00	0.07	0.00	5899.
24	4	87.0	86.0	7.70	0.00	0.20	22.00	6.22	0.11	0.09	0.00	0.07	0.00	6599.
25	4	86.0	85.0	7.90	0.00	0.20	22.00	6.17	0.87	0.09	0.00	0.07	0.00	7399.
26	1	85.0	84.0	8.10	0.00	0.20	22.00	6.47	1.77	0.09	0.00	0.07	0.00	8258.
27	1	84.0	83.0	8.30	0.00	0.20	22.00	7.00	1.11	0.09	0.00	0.07	0.00	9154.
28	1	83.0	82.0	8.50	0.00	0.20	22.00	7.40	0.59	0.09	0.00	0.07	0.00	10060.
29	1	82.0	81.0	8.81	0.00	0.20	22.00	7.71	0.42	0.09	0.00	0.07	0.00	11060.
30	1	81.0	80.0	9.18	0.00	0.20	22.00	7.94	0.11	0.09	0.00	0.07	0.00	12138.
31	1	80.0	79.0	9.50	0.00	0.20	22.00	8.12	0.34	0.09	0.00	0.07	0.00	13279.
32	1	79.0	78.0	9.80	0.00	0.20	22.00	8.26	0.27	0.09	0.00	0.07	0.00	14477.
33	1	78.0	77.0	10.02	0.00	0.20	22.00	8.41	0.94	0.08	0.00	0.06	0.00	15720.
34	1	77.0	76.0	10.34	0.00	0.20	22.00	8.56	0.94	0.08	0.00	0.06	0.00	17000.
35	1	76.0	75.0	10.66	0.00	0.20	22.00	8.74	0.66	0.08	0.00	0.06	0.00	18361.
36	1	75.0	74.0	10.98	0.00	0.20	22.00	8.93	0.99	0.09	0.00	0.06	0.00	19772.
37	1	74.0	73.0	11.30	0.00	0.20	22.00	9.10	0.63	0.09	0.00	0.06	0.00	21233.
38	1	73.0	72.0	11.60	0.00	0.20	22.00	9.24	0.39	0.09	0.00	0.06	0.00	22750.
39	1	72.0	71.0	11.90	0.00	0.20	22.00	9.39	0.42	0.09	0.00	0.06	0.00	24333.
40	1	71.0	70.0	12.20	0.00	0.20	22.00	9.54	0.20	0.09	0.00	0.06	0.00	25980.
41	1	70.0	69.0	12.50	0.00	0.20	22.00	9.70	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	27699.
42	1	69.0	68.0	12.80	0.00	0.20	22.00	9.83	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	29499.
43	1	68.0	67.0	13.10	0.00	0.20	22.00	9.97	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	31377.
44	1	67.0	66.0	13.40	0.00	0.20	22.00	10.11	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	33333.
45	1	66.0	65.0	13.70	0.00	0.20	22.00	10.24	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	35377.
46	1	65.0	64.0	14.00	0.00	0.20	22.00	10.37	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	37499.
47	1	64.0	63.0	14.30	0.00	0.20	22.00	10.50	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	39699.
48	1	63.0	62.0	14.60	0.00	0.20	22.00	10.63	0.00	0.08	0.00	0.06	0.00	41977.

\*\*\*\*\* SIMULACAO PERMANENTE \*\*\*\*\*

[illegible]



\*\*\*\*\* SIMULACAO PERMANENTE \*\*\*\*\*

TRF	ELT	DE	A	RIO	RIO	OXIGENIO	DBO	NH3	NOR2	COLI	ALGAS	ALGAS
ORD	NUM	KILO	KILO	VEL	PROF	REAER	DECAI	DECAI	DECAI	DECAI	CRESC	RESPR
				(MPS)	(M)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)
1	1	110.0	109.0	0.091	0.55	0.47	0.65	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	109.0	108.0	0.099	0.58	0.47	0.65	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	108.0	107.0	0.107	0.60	0.47	0.65	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	107.0	106.0	0.115	0.63	0.47	0.65	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	106.0	105.0	0.123	0.65	0.47	0.65	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	105.0	104.0	0.102	0.84	0.81	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	104.0	103.0	0.107	0.85	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	103.0	102.0	0.112	0.87	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	102.0	101.0	0.117	0.89	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	101.0	100.0	0.122	0.90	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	100.0	99.0	0.132	0.92	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	99.0	98.0	0.137	0.93	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	98.0	97.0	0.142	0.95	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	97.0	96.0	0.147	0.96	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	96.0	95.0	0.152	0.99	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	95.0	94.0	0.157	1.00	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	94.0	93.0	0.162	1.02	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	93.0	92.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	92.0	91.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	91.0	90.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	90.0	89.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	89.0	88.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	88.0	87.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	87.0	86.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	86.0	85.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	85.0	84.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	84.0	83.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	83.0	82.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	82.0	81.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	81.0	80.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	80.0	79.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	79.0	78.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	78.0	77.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	77.0	76.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	76.0	75.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	75.0	74.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	74.0	73.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	73.0	72.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	72.0	71.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	71.0	70.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	70.0	69.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	69.0	68.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	68.0	67.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	67.0	66.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	66.0	65.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	65.0	64.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	64.0	63.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00
1	1	63.0	62.0	0.167	1.03	1.15	0.69	0.15	1.00	1.50	0.00	0.00

SIMULACAO QUAL. DE AGUA  
QUAL II MODELO DE QUALIDADE DE AGUA

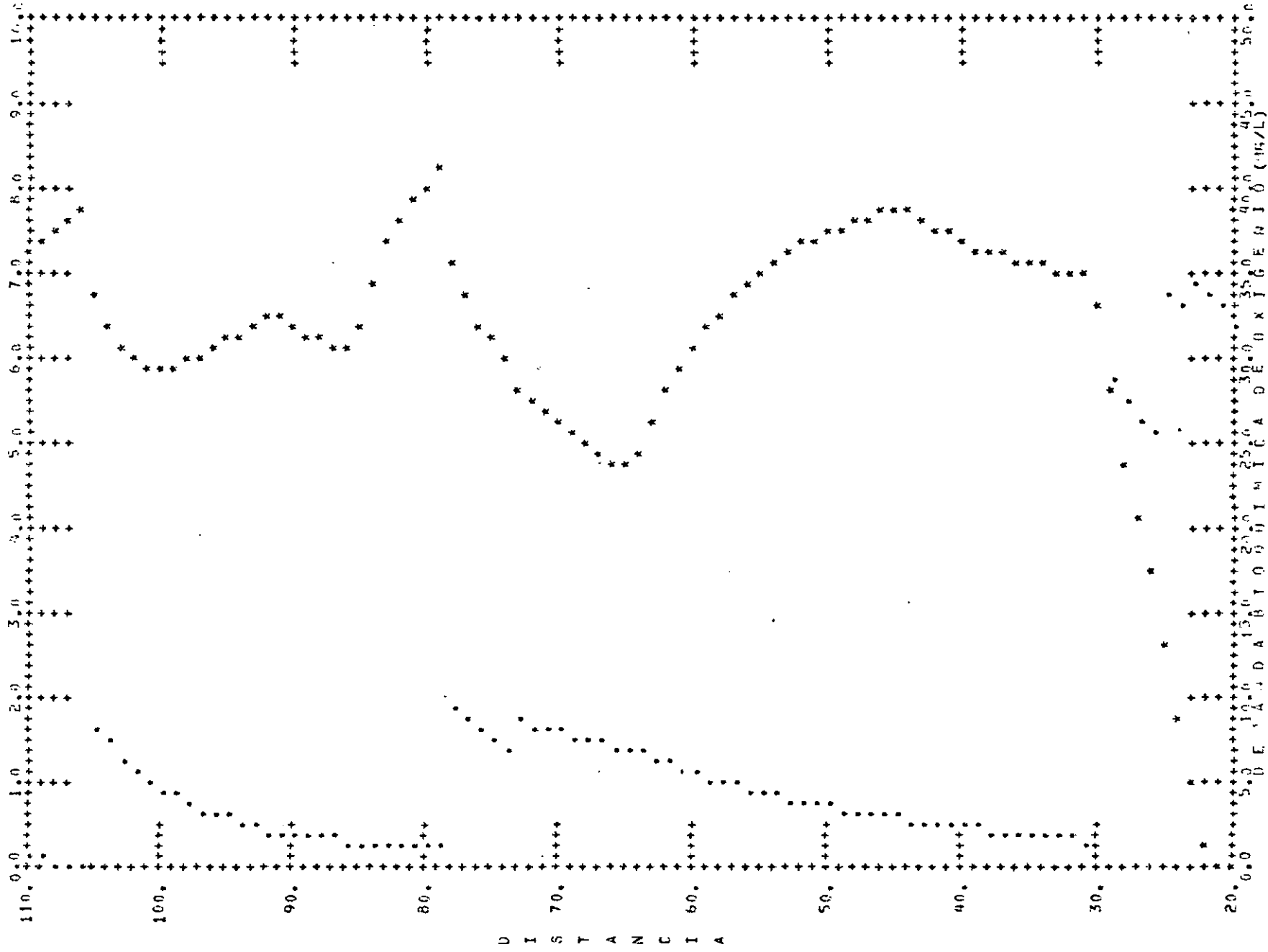
SAIDA NUM. PAGINA  
WRE/VERSAO SEMCOG

4

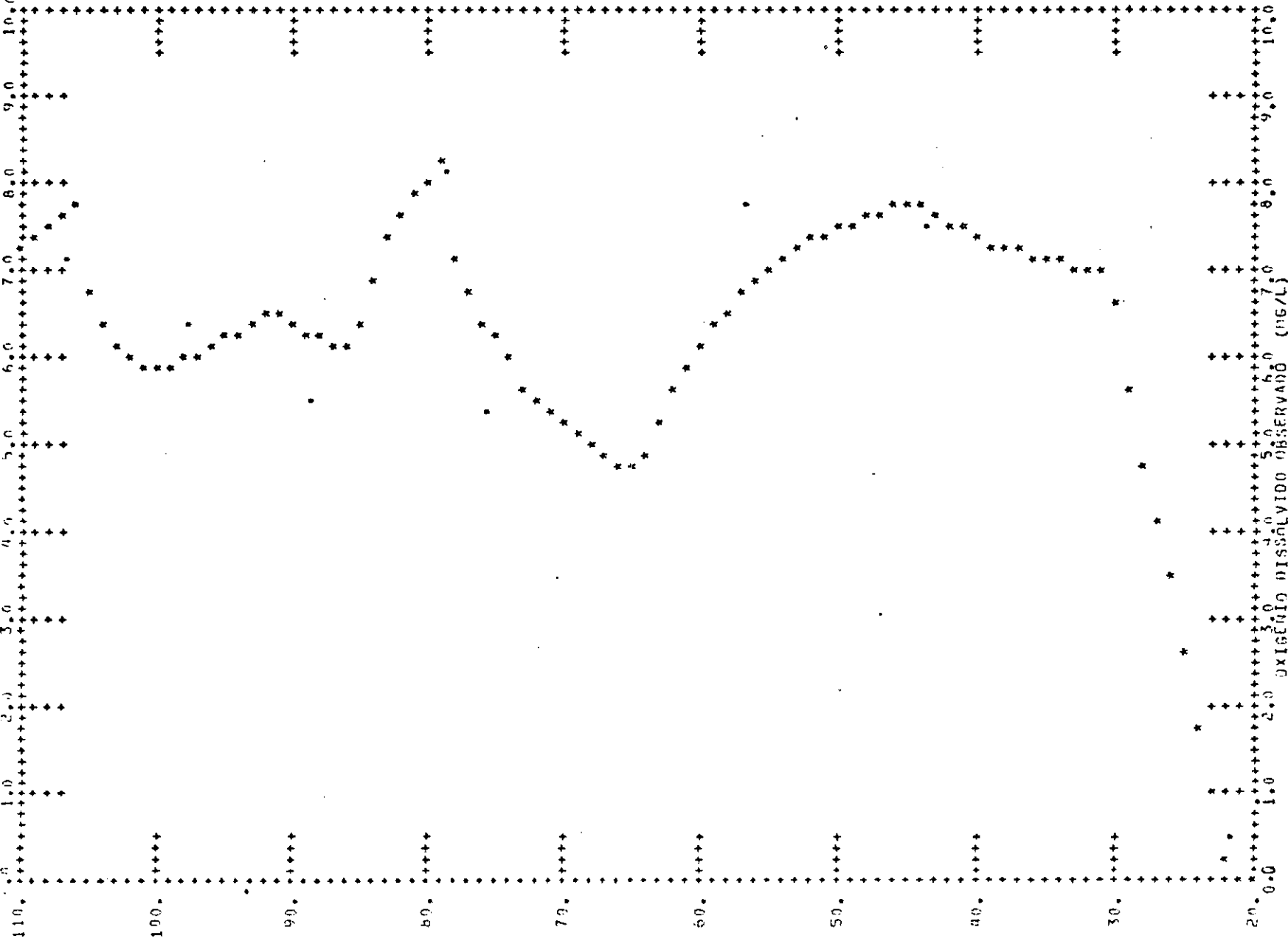
\*\*\*\*\* SIMULACAO PERMANENTE \*\*\*\*\*

TRE	ELT	DE	A	RIO	RIO	OXIGENIO	DBO	NH3	NO2	COLI	ALGAS	ALGAS
ORD	NUM	KILO	KILO	VEL	PROF	REAER	DECAI	DECAI	DECAI	DECAI	CRESC	RESPR
				(MPS)	(M)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)	(1/DI)
49	3	62.00	61.00	0.176	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
50	4	61.00	60.00	0.176	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
51	5	60.00	59.00	0.176	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
52	6	59.00	58.00	0.177	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
53	7	58.00	57.00	0.177	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
54	8	57.00	56.00	0.177	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
55	9	56.00	55.00	0.177	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
56	10	55.00	54.00	0.178	1.832	0.70	0.70	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
57	11	54.00	53.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
58	12	53.00	52.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
59	13	52.00	51.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
60	14	51.00	50.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
61	15	50.00	49.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
62	16	49.00	48.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
63	17	48.00	47.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
64	18	47.00	46.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
65	19	46.00	45.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
66	20	45.00	44.00	0.178	1.832	0.71	0.71	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
67	21	44.00	43.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
68	22	43.00	42.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
69	23	42.00	41.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
70	24	41.00	40.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
71	25	40.00	39.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
72	26	39.00	38.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
73	27	38.00	37.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
74	28	37.00	36.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
75	29	36.00	35.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
76	30	35.00	34.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
77	31	34.00	33.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
78	32	33.00	32.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
79	33	32.00	31.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
80	34	31.00	30.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
81	35	30.00	29.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
82	36	29.00	28.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
83	37	28.00	27.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
84	38	27.00	26.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
85	39	26.00	25.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
86	40	25.00	24.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
87	41	24.00	23.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
88	42	23.00	22.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
89	43	22.00	21.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
90	44	21.00	20.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
91	45	20.00	19.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
92	46	19.00	18.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
93	47	18.00	17.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
94	48	17.00	16.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
95	49	16.00	15.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00
96	50	15.00	14.00	0.178	1.832	0.72	0.72	0.15	1.00	1.00	0.00	0.00

\*\*\* = QINISIXO DE ACIMINIOIE TONNEN  
 \*\*\* = QINISIXO QINISIXO

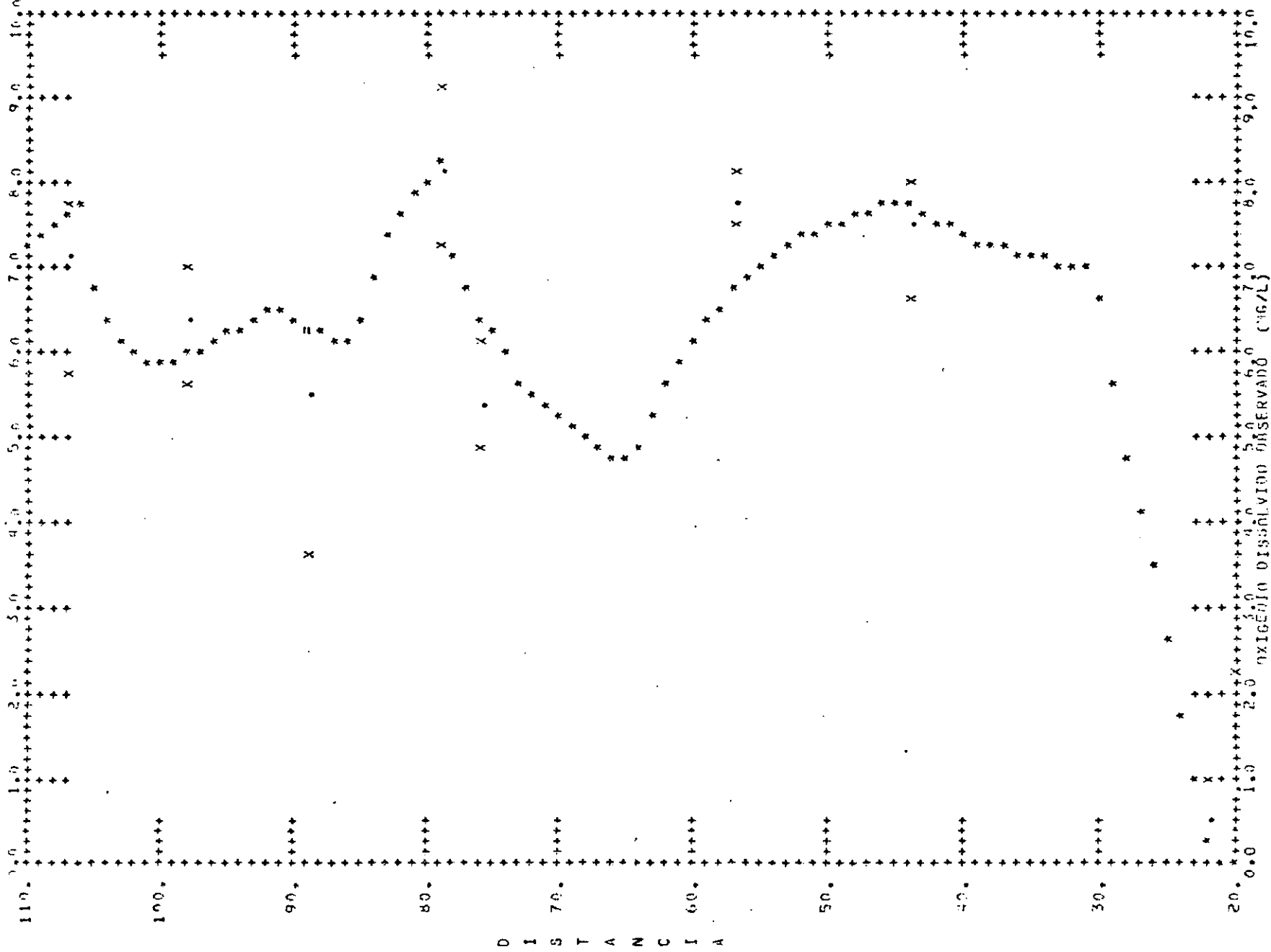


OXIGENIO DISSOLVIDO CALCULADO (MG/L)



..... = OXIGENIO DISSOLVIDO OBSERVADO  
 \* \* \* \* = OXIGENIO DISSOLVIDO CALCULADO

# OXIGÊNIO DISSOLVIDO CALCULADO (MG/L)



OXIGÊNIO DISSOLVIDO CALCULADO = \* \* \* \* \*  
 OXIGÊNIO DISSOLVIDO OBSERVADO = . . . . .  
 O.D. MÉDIOS E MÍNIMOS OBSERVADOS = X X X X X